

Chapitre 8

Réalisations expérimentales

Nous exposons dans ce chapitre les principes de base des réalisations expérimentales des algorithmes quantiques. L'illustration des principes sera faite dans le cadre de la résonance magnétique nucléaire (RMN), qui comme nous le verrons, a permis de réaliser certains algorithmes, tels que celui de Shor, en laboratoire. Même s'il n'est probablement pas possible d'aller au delà d'une dizaine de qubits avec la RMN, celle-ci a l'avantage d'illustrer de façon concrète et simple les principes universels qui s'appliquent aussi bien à d'autres technologies plus prometteuses. En effet quelque soit la technologie sous-jacente pour la fabrication et la manipulation de qubits effectifs, les hamiltoniens régissant leur dynamique ne peuvent être que des "polynômes" exprimés à partir des matrices de Pauli, contenant des termes linéaires et quadratiques à l'ordre le plus bas.

8.1 Les systèmes en jeu

Dans le cas de la RMN les qubits sont les moments magnétiques de noyaux atomiques de spin $1/2$, de molécules appropriées. Ces molécules sont naturelles ou éventuellement synthétiques, et forment un fluide ou solide macroscopique. La figure 8.1 montre deux molécules naturelles - le chloroforme et le trichloroéthylène - qui ont déjà été utilisées pour le calcul quantique. Comme nous le verrons, chaque molécule correspond en quelque sorte à un circuit quantique. Dans ces molécules les qubits en jeu sont les spin $1/2$ des noyaux d'hydrogène 1H , de carbone ^{13}C et de fluor ^{19}F . Le noyau de l'atome hydrogène est un proton qui possède un spin $1/2$. Le ^{13}C contient 6 protons et 7 neutrons¹. Dans l'état fondamental du noyau les spins des protons et

1. Il s'agit de l'isotope du ^{12}C contenant 6 protons et 6 neutrons et possède un spin total nul; le ^{14}C connu pour être utilisé pour la datation, est un autre isotope contenant

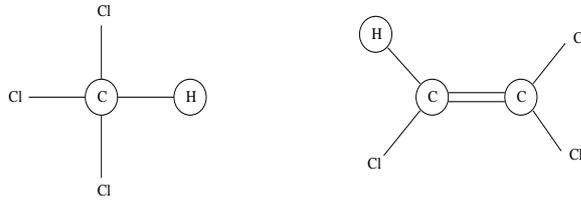


FIGURE 8.1 – Molécules de chloroforme (gauche) et trichloroéthylène (droite). Les atomes d'hydrogène 1H , carbone ^{13}C et fluor ^{19}F dont le noyau de spin $1/2$ est un qubit, sont entourés. Les noyaux des atomes de chlore possèdent un spin nul et ne sont pas des qubits.

neutrons se compensent entre eux, si bien que le spin total est $1/2$. La situation est similaire pour l'isotope ^{19}F du fluor qui possède 9 protons et 10 neutrons.

Le fluide (ou le solide) à température ambiante, est placé dans une région où règne un champ magnétique statique $\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$ orienté dans la direction z , d'intensité $B_0 \approx 1 - 10T$. Il s'agit d'un champ très intense : $1T = 10^5$ Gauss, le Gauss étant l'ordre de grandeur du champ magnétique terrestre. Les fréquences de Larmor des moments magnétiques des noyaux 1H , ^{13}C , ^{19}F sont de l'ordre de grandeur $\omega_L \approx 10 - 100MHz$ ($1MHz = 10^6Hz$).

Les portes à un qubit sont réalisées par des pulses de radiofréquence $\vec{B}_1 e^{i\omega t}$ d'intensité $\omega_1 \approx 0.1 - 1MHz$. Ces pulses sont générés par une ou des bobines parcourues par un courant alternatif de radiofréquence ω . Il est possible d'agir sélectivement sur un type de qubit 1H , ^{13}C , ^{19}F en réglant ω sur la fréquence de Larmor du qubit (cas résonant). L'influence sur les autres qubits ayant une fréquence de Larmor différente (non résonnante) peut être négligé. Nous verrons que l'environnement chimique d'un qubit dans la molécule a un effet correctif sur les fréquences de Larmor. Ce point est important, d'une part car il faut régler les fréquences de résonance suffisamment précisément, et d'autre part car cela permet d'agir sélectivement et distinguer les qubits de noyaux identiques. L'intensité ω_1 donne l'ordre de grandeur de la durée de la porte $\tau_1 \approx \frac{2\pi}{\omega_1} \approx 10^{-6}$ sec.

Les portes à deux qubit sont réalisées par la nature elle-même. Comme nous le verrons, il est possible de prendre avantage de l'interaction spin-spin de type Heisenberg pour réaliser des portes à deux qubits. La durée de ces portes est déterminée par l'intensité du couplage spin-spin, et est d'environ 10^{-3} sec. Celle-ci est donc mille fois plus longue que la durée des portes à un

6 protons et 8 neutrons, et son spin total est aussi nul. Les atomes de carbone sont électriquement neutres et contiennent tous 6 électrons ; les propriétés chimiques sont régies par le nuage électronique et sont donc identiques pour des isotopes.

qubit. Cette dernière pourra en première approximation être négligée.

A ce point il est instructif de se faire une image des différentes échelles d'énergies en jeu. Le "circuit quantique moléculaire" est contrôlé grâce aux pulses de radiofréquence. L'énergie mise en jeu dans ces pulses de radiofréquence est $\hbar\omega_1 \approx 10^{-6}$ eV. Celle-ci est au moins mille fois plus faible que toutes les autres énergies en jeu, si bien que ces pulses n'affectent en rien la structure moléculaire. En effet les énergies d'excitations du nuage électronique sont de l'ordre de l'eV²; l'énergie du spitting Zeeman des spins électroniques est de l'ordre de 10^{-3} eV³.

Le calcul quantique par RMN porte simultanément sur un nombre macroscopique de molécules, et la mesure collective finale produit directement un résultat statistique. Pour pouvoir manipuler les moments magnétiques des noyaux actifs dans la molécule il faut pouvoir caractériser et séparer de façon suffisamment précise leurs fréquences de Larmor. Ceci n'est possible que pour des molécules de tailles relativement, faibles contenant jusqu'à une dizaine de qubits. Même s'il était possible de synthétiser des molécules avec une centaine ou un millier de noyaux représentant les qubits actifs, les fréquences de Larmor formeraient un quasi-continuum et il deviendrait difficile de les manipuler et/ou de maintenir la cohérence des états quantiques. En effet dans ce cas, d'une part les énergies d'excitations thermiques, et d'autre part la largeur des pulses de radiofréquence sont plus grandes que les différences entre fréquences de Larmor. C'est une des raisons pour lesquelles il n'a pas été encore possible d'utiliser la RMN pour fabriquer un ordinateur quantique fonctionnant sur plus d'une dizaine de qubits. Une autre raison importante provient du fait que les spins de l'état initial ne sont pas suffisamment bien polarisés, et leur état est loin d'être un état pur. C'est un état équilibre thermique. Une des innovations des expériences par RMN fut de transformer l'état thermique en état "pseudo-pur". Ce dernier point dépasse le cadre de ce cours ne sera pas abordé ici⁴.

8.2 Oscillations de Rabi et portes à un qubit

Ce paragraphe résume l'essentiel de la théorie des oscillations de Rabi, qui sont à la base de la réalisation des portes à un qubit telles que les portes

2. $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Joule}$, $J = \text{kg m}^2/\text{s}^2$, et $\hbar = 6,58211928(15) \cdot 10^{-16} \text{ eV}$.

3. L'énergie d'excitation interne des noyaux est 10^6 eV , et pour les nucléons $\sim 10^9 \text{ eV}$ (l'échelle de la chromodynamique quantique).

4. A titre d'information indiquons qu'un état pseudo-pur est une matrice densité de la forme $\rho = \alpha Id + \delta|\Psi\rangle\langle\Psi|$. La moyenne de toute observable A à trace nulle, satisfait $\text{Tr}\rho A = \delta\langle\Psi|A|\Psi\rangle$. Lorsque l'on transforme l'état thermique en état pseudo-pur, δ diminue avec le nombre de qubits et le signal résultant de la mesure devient trop faible

de Hadamard, les rotations autour de x , y ou z , ou encore les $\pi/2^k$ shifts.

L'hamiltonien d'un moment magnétique dans un champ $\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$ est

$$H = -\frac{g\hbar}{2m}\vec{B}_0 \cdot \vec{\sigma} = -\frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma_z.$$

Pour le noyau d'hydrogène 1H , $g \approx 5.59$, $m = 10^{-27}$ kg et $q = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C, ce qui donne une fréquence de Larmor $\omega_L \approx 100$ MHz. L'évolution temporelle d'un état est donnée par ⁵

$$|\psi\rangle = e^{i\frac{\varphi+\omega_L t}{2}} \cos\frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + e^{-i\frac{\varphi+\omega_L t}{2}} \sin\frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle.$$

On peut se faire une image de cette dynamique en représentant l'état par un vecteur sur la sphère de Bloch. Ce vecteur possède un angle θ constant avec z , et effectue un mouvement de précession de fréquence ω_L autour de l'axe z .

Lors d'une expérience de RMN le champ $B_0 \approx 1 - 10$ Tesla est fixé une fois pour toute, et tous les moments magnétiques effectuent un mouvement de précession autour de z , avec une fréquence de Larmor qui leur est propre.

Pour manipuler les moments magnétiques on utilise un champ de radio-fréquences, de fréquence ω et d'intensité $B_1 \approx 10^{-2}$ Tesla. Pour que ce champ influence notablement un moment magnétique il faut régler sa fréquence sur la fréquence de résonance $\omega \approx \omega_L$. Dans ce cas le spin peut absorber ou émettre un quantum d'énergie $\hbar\omega$ précisément égal à la différence entre les niveaux d'énergie du moment magnétique dans le champ \vec{B}_0 . Un basculement du spin autour des axes x et/ou y est réalisé en enclenchant le champ de radio-fréquences $\vec{B}_1(t) = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, 0)$. L'hamiltonien est

$$H = -\frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma_z - \frac{\hbar\omega_1}{2}(\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t).$$

Le calcul de l'opérateur d'évolution donne alors (si $\omega = \omega_L$)

$$\text{prob}(|\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle) = |\langle\downarrow|U(t)|\uparrow\rangle|^2 = \sin^2 \frac{\omega_1 t}{2}.$$

Nous voyons que la probabilité de transition oscille entre 0 et 1 avec une période égale à $\frac{2\pi}{\omega_1} \approx 10^{-6}$ sec. Ce sont les oscillations dites de Rabi.

Porte NOT. Si l'on pose $t = \frac{\pi}{\omega_1}$ (moitié d'une période de Rabi) on trouve

$$U\left(\frac{\pi}{\omega_1}\right) = \sigma_x = \text{NOT}.$$

5. L'état initial est obtenu en posant $t = 0$.

Ainsi, pour réaliser une porte NOT il suffit d'enclencher le champ de radio-fréquences pendant une durée $\frac{\pi}{\omega_1}$. Cette opération, s'appelle aussi un π -pulse et retourne le spin $|\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$.

Porte de Hadamard. Pour $t = \frac{\pi}{2\omega_1}$ (quart d'une période de Rabi) on trouve

$$U\left(\frac{\pi}{2\omega_1}\right) = H.$$

Pour réaliser une porte H il suffit d'enclencher le champ de radio-fréquences pendant une durée $\frac{\pi}{2\omega_1}$. Cette opération, s'appelle aussi un $\pi/2$ -pulse et fait basculer un spin, initialement le long de z , dans le plan xy . $|\uparrow\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle)$ et $|\downarrow\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle - |\uparrow\rangle)$.

Autres portes. En théorie, on peut procéder de façon similaire pour réaliser d'autres opérations à un qubit, comme par exemple les rotations autour de z . Nous noterons qu'en pratique, vu la configuration des bobines, on ne peut pas créer des pulses de radiofréquences le long de z . Pour réaliser la rotation d'un qubit autour de z on utilise plutôt un déphasage des signaux ultérieurs sur ce qubit, ce qui simule une rotation du référentiel autour de z . Ce déphasage dépend de la fréquence de Larmor du qubit en question.

Finalement il est important de noter que les pulses de radio-fréquences agissent sélectivement sur les qubits associés aux noyaux 1H , ^{13}C , ^{19}F car les fréquences de Larmor sont bien séparées. Nous verrons que cela est aussi possible pour des noyaux identiques car leur environnement chimique dans la molécule modifie légèrement leurs fréquences de Larmor.

8.3 Couplage spin-spin et portes à deux qubits

Les portes à deux qubits exploitent l'interaction naturelle entre moments magnétiques. L'évolution temporelle correspondant à cette interaction est un opérateur unitaire qui ne peut pas se ramener au produit tensoriel de deux unitaires à un qubit. En d'autres termes cette interaction crée de l'intrication et permet en particulier de réaliser la porte $CNOT$. Notons immédiatement que cela ne va pas sans poser de problèmes car cette interaction n'est pas enclenchable ou déclenchable à souhait. En effet elle est *naturelle*! Ce problème peut être contourné grâce à la technique de *refocalisation* qui fait l'objet de la section suivante.

Pour deux moments magnétiques nucléaires dans la molécule, reliés par un axe \vec{n} l'interaction dipolaire magnétique est de la forme

$$\hbar J_{\text{dip}}(3(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{n})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{n}) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2).$$

La constante de couplage décroît comme l'inverse du cube de la distance entre moments magnétiques. Notez qu'il y a dans cette expression deux structures algébriques : le produit scalaire dans l'espace Euclidien et le produit tensoriel entre matrices de Pauli dans l'espace de Hilbert des spins. Ce premier terme ne joue pas de rôle dans un fluide car les rotations thermiques des molécules induisent un effet de moyenne sur le vecteur \vec{n} . En effet $\langle n_i \rangle = 0$ et $\langle n_i^2 \rangle = \frac{1}{3}$ ($i = x, y, z$) entraînent

$$\langle (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{n})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{n}) \rangle = \frac{1}{3} \langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \rangle$$

et donc l'interaction dipolaire magnétique s'annule en moyenne dans un fluide à l'équilibre thermique. Les moments magnétiques interagissent aussi avec le nuage électronique qui est dans leur environnement, ce qui entraîne une interaction effective, à travers les liaisons chimiques, entre spin nucléaires. L'analyse⁶ de ces effets est non-triviale et conduit à un hamiltonien de type Heisenberg (anisotrope)

$$\sum_{i,j=x,y,z} \hbar J_{ij} \sigma_{1i} \otimes \sigma_{2j}.$$

En fait $J_{ij} \ll \hbar\omega_L$ et cet hamiltonien peut être considéré comme une petite perturbation de l'hamiltonien de départ régissant la précession de Larmor, qui lui est diagonal dans la base computationnelle. Un calcul de perturbation à l'ordre le plus bas montre alors qu'il suffit de retenir la composante z de cette interaction.

Tout compte fait, le couplage entre spins sera modélisé par (on posera $J_{zz} = J$)

$$\mathcal{H}_{int} = \hbar J \sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}.$$

L'évolution unitaire associée à cette interaction est

$$U_{int}(t) = \exp\left(-\frac{it}{\hbar} \mathcal{H}_{int}\right) = \exp(-itJ \sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}).$$

C'est une matrice 4×4 diagonale dans la base computationnelle. Ses éléments diagonaux sont e^{-itJ} ; e^{itJ} ; e^{itJ} ; e^{-itJ} . De plus $\hbar J \ll \hbar\omega_1$ ($\ll \hbar\omega_L$). Cette séparation entre échelles d'énergies est très importante car elle signifie que *l'échelle de temps des interactions est mille fois plus grande que la durée des portes à un qubit*. En effet $\tau_{int} \approx \frac{2\pi}{J} \approx 10^{-2} - 10^{-3}$ sec, alors que $\tau_{pulse} \approx \frac{2\pi}{\omega_1} \approx 10^{-6}$ sec. Ainsi le pas de temps élémentaire des calculs quantiques par RMN est de l'ordre de la millièrne de seconde. Cette échelle de

6. Celle-ci fait appel à l'interaction de contact de Fermi entre le nuage électronique et le noyau, le principe de Pauli et la règle de Hund.

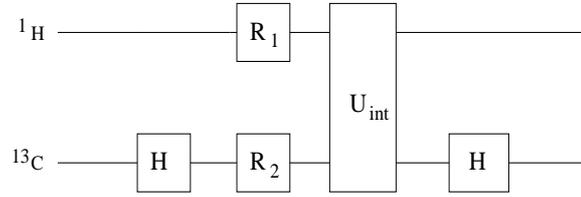


FIGURE 8.2 – Circuit correspondant à l'identité pour la porte $CNOT$. Ici U_{int} est l'évolution unitaire due au couplage spin-spin. Les portes à un qubit sont réalisées grâce à des pulses de radiofréquences.

temps n'est pas particulièrement faible, comparée aux échelles de temps des ordinateurs classiques ; mais le gain potentiel du calcul quantique provient de la complexité potentiellement polynômiale des algorithmes, comparée à une complexité potentiellement exponentielle dans le cas classique.

L'identité suivante (exercice), et son circuit correspondant (figure 8.3), est à la base de la réalisation de la porte $CNOT$.

$$CNOT = (\mathbb{I} \otimes H)(R_1 \otimes R_2)U_{\text{int}}(t = \frac{\pi}{4J_z})(\mathbb{I} \otimes H)$$

ou

$$R_1 = \exp(i\frac{\pi}{2}\frac{\sigma_{1z}}{2}), \quad R_2 = \exp(i\frac{\pi}{2}\frac{\sigma_{2z}}{2}).$$

Prenons l'exemple de la molécule de chloroforme, où les qubits sont les moments magnétiques des noyaux 1H et ^{13}C . Supposons que 1H est le qubit 1 et ^{13}C le qubit 2. Le protocole expérimental pour réaliser la porte $CNOT$ est le suivant :

- A l'instant initial, envoyer un $\frac{\pi}{2}$ -pulse de fréquence $\omega = \omega_L^C$, dans le plan xy : cela réalise la porte de Hadamard sur le deuxième qubit. L'hamiltonien correspondant est

$$-\frac{\hbar\omega_1}{2}(\sigma_x \cos \omega_L^C t + \sigma_y \sin \omega_L^C t).$$

- Puis envoyer deux $\frac{\pi}{2}$ -pulses de fréquences $\omega = \omega_L^H$ et $\omega = \omega_L^C$, dans la direction z : cela réalise les deux rotations R_1 et R_2 d'angle $\pi/2$ autour de z . L'hamiltonien correspondant est

$$-\frac{\hbar\omega_1}{2}\sigma_z(\cos \omega_L^H t + \cos \omega_L^C t).$$

- Attendre un temps $\tau = \frac{\pi}{4J}$. Pendant ce temps les deux qubits évoluent selon leur interaction naturelle d'hamiltonien

$$\hbar J \sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}.$$

- A l’instant final, envoyer un $\frac{\pi}{2}$ -pulse, dans le plan xy , de fréquence $\omega = \omega_L^C$: cela réalise la dernière porte de Hadamard sur le deuxième qubit. L’hamiltonien correspondant est le même que ci-dessus.

Bien sur, l’interaction naturelle $\hbar J \sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}$ agit aussi pendant les opérations sur les qubits individuels (les $\pi/2$ -pulses). Donc ce protocole expérimental ne réalise la porte *CNOT* qu’approximativement. Mais le point important est que cette approximation est excellente, dans la mesure où la durée des $\pi/2$ pulses est négligeable - et peuvent donc être considérés instantanés - par rapport à $\tau_{\text{int}} = \frac{\pi}{4J}$. Finalement, n’oublions pas qu’au cours de toutes ces opérations les spins effectuent leur précession de Larmor autour de la direction de \vec{B}_0 .

8.4 Refocalisation

Considérons pour fixer les idées l’état obtenu après avoir effectué le protocole du paragraphe précédent pour la porte *CNOT*. A priori cet état continue à évoluer avec l’interaction naturelle entre les moments magnétiques. Comment pouvons nous le préserver pendant un temps appréciable, disons de l’ordre de la milliseconde? Une autre situation d’intérêt serait celle où nous voudrions effectuer des opérations sur certains qubits, tout en maintenant d’autres qubits dans un état donné pendant un temps de l’ordre de la milliseconde. A priori cela peut sembler difficile dans la mesure où les interactions naturelles ne peuvent pas être déclenchées à volonté. La technique de *refocalisation* permet de contourner le problème. Celle-ci joue un rôle capital dans la réalisation expérimentale des algorithmes : en fait comme nous l’illustrons dans le dernier paragraphe, la plupart des opérations effectuées sont relatives à la refocalisation.

Soit $t_{\text{in}} < t_{\text{fin}}$ deux instants initiaux et finaux, tels que $t_{\text{fin}} - t_{\text{in}}$ soit de l’ordre de quelques millisecondes. Soit $|\psi_{\text{in}}\rangle$ l’état initial, d’un système de deux qubits, que l’on veut préserver. Son évolution naturelle le conduirait à l’état final

$$|\psi_{\text{fin}}\rangle = \exp(-i(t_{\text{fin}} - t_{\text{in}})J\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z})|\psi_{\text{in}}\rangle.$$

Supposons maintenant qu’aux instants $\frac{t_{\text{fin}}+t_{\text{in}}}{2}$ et t_{fin} nous agissions avec un π -pulse correspondant à la rotation

$$R_{1x} = \exp(i\pi \frac{\sigma_{1x}}{2}) \otimes \mathbb{I}_2$$

d’angle π et d’axe x agissant sur le premier qubit (par exemple 1H). Comme ces pulses ont une durée négligeable par rapport à la durée totale de l’évolu-

tion, le nouvel état final - appelons le $|\psi_{\text{refoc}}\rangle$ - sera donné par

$$\begin{aligned} & |\psi_{\text{refoc}}\rangle \\ & \approx R_{1x} \exp\left(-\frac{i(t_{\text{fin}} - t_{\text{in}})}{2} J\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}\right) R_{1x} \exp\left(-\frac{i(t_{\text{fin}} - t_{\text{in}})}{2} J\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}\right) |\psi_{\text{in}}\rangle. \end{aligned}$$

Il n'est pas difficile de vérifier (exercice) l'identité mathématique exacte

$$\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 = R_{1x} \exp\left(-i\frac{t}{2} J\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}\right) R_{2x} \exp\left(-i\frac{t}{2} J\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}\right),$$

valable pour tout t et J . Donc

$$|\psi_{\text{refoc}}\rangle \approx |\psi_{\text{in}}\rangle,$$

l'état obtenu par l'opération de refocalisation est une très bonne approximation de l'état initial (idéalement voulu).

Le principe général exposé ci-dessus peut être appliqué à des situations plus compliquées. En un mot, l'idée principale est de "corriger" la dynamique naturelle en agissant avec de courts pulses sur les qubits individuels.

8.5 Déplacements chimiques et effets de couplage

Il existe un effet important dont n'avons pas encore tenu compte : le déplacement chimique (ou chemical shift). Dans l'environnement de la molécule la fréquence de Larmor nue d'un noyau est modifiée par l'environnement chimique du noyau. En effet le champ local ressenti par un noyau est égal à B_0 plus des corrections diamagnétiques et paramagnétiques provenant du nuage électronique. Cela est important car des noyaux identiques auront des fréquences de Larmor légèrement différentes, ce qui permet de les adresser individuellement par les pulses de radiofréquences. Le décalage de ces fréquences de Larmor est appelé *déplacement chimique*.

Il y a encore un autre effet important sur les fréquences de Larmor dont il faut tenir compte, qui provient du couplage spin-spin. Celui-ci entraîne un "éclatement" de chaque fréquence de Larmor en plusieurs fréquences satellites. Pour fixer les idées considérons à nouveau la molécule de chloroforme. Supposons que l'état du ^{13}C soit $|\phi\rangle$. Dans ce cas l'hamiltonien effectif de ^1H sera

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\frac{\hbar\omega_L^H}{2}\sigma_z^H + \hbar J_{HC}\sigma_z^H \langle\phi|\sigma_z^C|\phi\rangle.$$

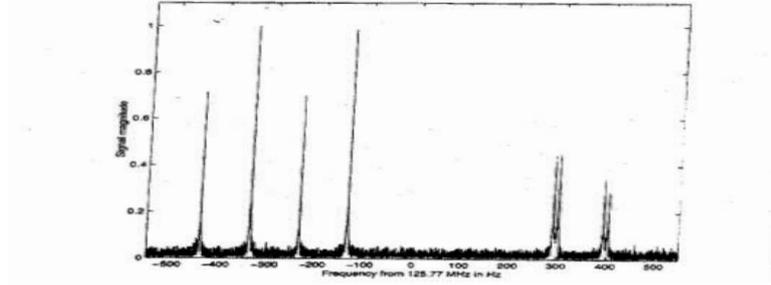


FIGURE 8.3 – Spectre des deux ^{13}C dans la molécule de trichloroéthylène. L’origine des fréquences est placée à 125.77MHz et l’échelle horizontale est en Hz. [Source : Nielsen and Chuang, Quantum Computation and Information, CUP].

Selon que $|\phi\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ on obtient

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\frac{\hbar(\omega_L^H \pm 2J_{HC})}{2}\sigma_z^H$$

et on trouve deux fréquences de Larmor effectives pour ^1H . La fréquence de précession est $\omega_L^H - 2J_{HC}$ quand ^{13}C est dans l’état $|\uparrow\rangle$, et $\omega_L^H + 2J_{HC}$ quand ^{13}C est dans l’état $|\downarrow\rangle$. De façon similaire le ^{13}C possède deux fréquences de Larmor $\omega_L^C - 2J_{z}$ et $\omega_L^C + 2J_z$ selon que ^1H est dans l’état $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$.

Considérons la molécule de trichloroéthylène (figure 8.1). Les deux atomes de ^{13}C n’ont pas un environnement chimique identique si bien que les déplacements chimiques de leur fréquence de Larmor diffèrent. Cela est bénéfique car nous pouvons distinguer les deux qubits ! De plus chacune de ces fréquences est éclatée à cause du couplage spin-spin. Il n’est pas difficile de voir que pour la molécule de trichloroéthylène il y a *trois groupes de quatre fréquences*. En effet ω_L^H est éclatée en quatre fréquences satellites correspondantes aux quatre états possibles des deux C^{13} , $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$. De même ω_L^C est éclatée en deux groupes (un pour chaque carbone) de quatre fréquences chacun correspondantes aux quatre états des noyaux voisins. La figure 8.5 donne le spectre des deux ^{13}C . Les quatre fréquences de ^1H sont plus élevées et ne figurent pas sur cette échelle.

Il est facile de généraliser. Pour une molécule avec N noyaux de spin 1/2 (ou N qubits) il y a à priori N fréquences de Larmor (à cause du déplacement chimique ceci est le cas même si les noyaux sont identiques). A cause du couplage spin-spin on aura en réalité N groupes de 2^{N-1} fréquences satellites⁷. Ces effets sont très importants en spectroscopie par RMN. Les spectres

7. Ceci est vrai si tous les déplacements chimiques sont différents. Sinon certaines de ces fréquences satellites sont confondues.

moléculaires représentent une signature de la structure moléculaire, qu'il est souvent possible d'inférer à partir des différents groupes de fréquences. Le nombre, la position et l'intensité des pics donnent de précieuses informations sur la molécule. En ce qui concerne les réalisations expérimentales des algorithmes quantique, il faut tenir compte de cet effet pour régler avec assez de précision la fréquence des pulses. Il permet aussi comme indiqué plus haut de distinguer les qubits associés à des noyaux identiques. Nous allons voir dans le paragraphe suivant qu'il permet aussi de lire les états de la base computationnelle.

8.6 Lecture des qubits

Dans les expériences de RMN l'observation de l'état moléculaire est réalisé grâce à une mesure sur un ensemble statistique de qubits. Le signal obtenu est donc directement une valeur moyenne. Ainsi il ne s'agit pas vraiment de la mesure projective d'un état quantique individuel, mais plutôt d'une mesure collective. Bien sur, la valeur moyenne obtenue est conforme au postulat de la mesure.

Imaginons une expérience de RMN qui consiste à agir sur une solution moléculaire par une suite de pulses créés grâce à une bobine traversée par un courant alternatif. Cette même bobine va servir pour la mesure. L'état final des qubit $|\Psi_{\text{fin}}\rangle$ possède un moment magnétique total (dans ce paragraphe nous laissons tomber les facteurs de proportionnalité et les constantes)

$$\vec{M}_{\text{fin}} \sim \langle \Psi_{\text{fin}} | \sum_{i=1}^N \vec{\sigma}_i | \Psi_{\text{fin}} \rangle.$$

Cette aimantation macroscopique précesse dans le champ \vec{B}_0 (autour de z) ce qui induit, en conformité avec la loi de Faraday, une tension et un courant dans la bobine (ici nous supposons que la bobine est orientée selon x et que sa résistance est R)

$$i(t) = RV(t) \sim -\frac{d}{dt}M_x(t).$$

Ce signal est une combinaison linéaire de signaux sinusoidaux de fréquences égales aux différentes fréquences de Larmor constituant la précession de l'aimantation. Une analyse de Fourier donne un spectre de fréquences de Larmor (corrigées par les déplacements chimiques). Notons que le signal est exponentiellement décroissant sur une échelle $O(T)$, dans le domaine temporel, à cause des effets de relaxation de l'aimantation vers une valeur d'équilibre

(décohérence). Dans le domaine fréquentiel cela se traduit par un élargissement $O(\frac{1}{T})$ des raies spectrales. Si cet élargissement est trop grand, c'est à dire la décroissance exponentielle du signal trop rapide, la mesure perd en précision.

Pour une seule fréquence on a

$$i(t) \sim e^{-t/T} \cos \omega_L t.$$

La raie spectrale correspondante est une fonction Lorentzienne

$$\hat{i}(\omega) \sim \frac{T}{1 + (\omega - \omega_L)^2 T^2}.$$

Appliquons ces principes à la lectures des états de la base computationnelle. Nous n'allons pas tenir compte des effets de relaxation, dont la description dépasse le formalisme élémentaire utilisé ici. Commençons par le cas le plus simple d'un état à N qubits ayant tous la même fréquence de Larmor, et de la forme

$$|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle.$$

Un $\pi/2$ -pulse renverse cet état dans le plan xy ,

$$|\Psi_{\text{fin}}\rangle = (|\uparrow\rangle + e^{-it\omega_L} |\downarrow\rangle) \otimes \dots \otimes (|\uparrow\rangle + e^{-it\omega_L} |\downarrow\rangle)$$

(à une phase globale près). Cet état possède une aimantation macroscopique $(M_x(t), M_y(t), 0)$ précessant autour de z . Un calcul simple donne

$$M_x(t) \sim N \sin \omega_L t,$$

ce qui implique pour le courant sinusoidal traversant la bobine

$$i(t) \sim N\omega \cos \omega_L t, \quad \text{et} \quad \hat{i}(\omega) \sim N\delta(\omega - \omega_L), \omega > 0.$$

En commençant avec l'état initial $|\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$ le $\pi/2$ -pulse donne l'état $|\Psi_{\text{fin}}\rangle = (|\uparrow\rangle - e^{-it\omega_L} |\downarrow\rangle) \otimes \dots \otimes (|\uparrow\rangle - e^{-it\omega_L} |\downarrow\rangle)$, et mène finalement a

$$M_x(t) \sim -N \sin \omega_L t$$

et

$$i(t) \sim -N\omega \cos \omega_L t, \quad \text{et} \quad \hat{i}(\omega) \sim -N\delta(\omega - \omega_L), \omega > 0.$$

Ces calculs simples permettent de tirer un enseignement intéressant.

- Un qubit dans l'état $|\uparrow\rangle$ donne des pics *positifs*⁸.

8. En pratique on verra plusieurs pics a cause de l'effet du couplage avec les autres qubits.

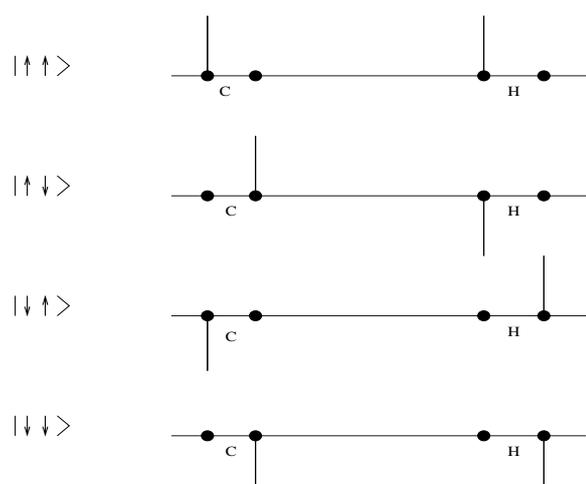


FIGURE 8.4 – Représentation schématique des spectres de RMN correspondants aux états de la base computationnelle du chloroforme (axe horizontal = fréquences de Larmor).

- Un qubit dans l'état $|\downarrow\rangle$ donne des pics *negatifs*.
- Un qubit dans un état de superposition $\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ donne un spectre avec des pics *positifs et negatifs*.

La figure 8.6 donne une représentation schématique des pics associés aux états de la base computationnelle pour le cas de la molécule de chloroforme.

8.7 Réalisation de l'algorithme de Shor

Nous exposons ici les grandes lignes d'une expérience remarquable de Vandersypen-Steffen-Breyta-Yannoni-Sherwood-Chuang "*experimental realization of quantum factoring using nuclear magnetic resonance*", Nature vol 414 pp. 883-887 (2001). Dans cette expérience le nombre 15 est factorisé expérimentalement en suivant les principes de l'algorithme de Shor. En fait il s'agit de calculer la période de la fonction $f(x) = a^x \bmod 15$ pour a premier avec 15. Ces auteurs ont réalisé l'expérience dans les deux cas $a = 11$ et $a = 7$. Ici nous allons illustrer cette expérience pour $a = 7$. Cette expérience, bien que ridicule du point de vue mathématique, est importante car elle prouve que les principes du calcul quantique peuvent être réalisés en laboratoire. D'autre part elle représente un tour de force de toute beauté.

Tout d'abord nous résumons la théorie de l'algorithme de Shor dans le cas concret qui nous intéresse ici.

La fonction $f(x) = 7^x \bmod 15$ est représentée sur la figure pour les entiers

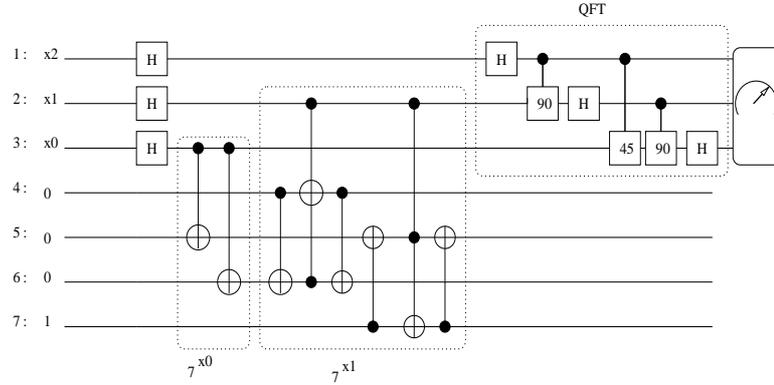


FIGURE 8.5 – Circuit de l’algorithme de Shor pour $N = 15$ et $a = 7$. Les qubits numérotés de 1 à 7 correspondent aux spins des noyaux de la molécule de la figure 8.7. Les bits $x_2x_1x_0$ représentent les entiers $x \in \{0, 1, \dots, 7\}$. L’état entrant est $|000\rangle \otimes |0001\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$.

$x \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, \dots\}$. Nous voyons que la période est $r = 4$. En d’autres termes l’ordre de 7 modulo 15 est égal à 4, un nombre pair. La factorisation est donc obtenue en calculant $\text{PGCD}(7^{4/2} \pm 1; 15) = 3$ et 5.

Pour voir la périodicité de cette fonction il suffit de travailler avec les entiers $\{0, \dots, 7\}$. Il faut trois qubit pour représenter les kets associés $|x\rangle$. Ainsi nous prendrons $M = 2^3 = 8$. Nous avons aussi besoin de stocker les images $7^x \bmod 15$. Pour cela il faut au plus 4 qubits. Il nous suffit donc de travailler avec 7 qubits au total. Notons aussi que si $x = x_0 + 2x_1 + 4x_2 + 8x_3$,

$$a^x = a^{x_0} a^{2x_1} a^{4x_2} a^{8x_3}$$

et donc pour $a = 7$ (puisque $7^4 = 1$)

$$7^x = 7^{x_0} 7^{2x_1}.$$

L’exponentielle modulaire est donc contrôlée seulement par les bits x_0 et x_1 . Le circuit de Shor est donné sur la figure 8.7. Cette figure illustre aussi la réalisation des deux multiplications contrôlées par 7^{x_0} et 7^{x_1} . Celle-ci fait intervenir uniquement des portes *CNOT* et nous laissons au lecteur le soin de vérifier que ce sont les circuits voulus.

Nous distinguons quatre phases dans l’évolution unitaire du circuit quantique. Cela sera pratique pour discuter l’expérience. Dans la phase (0) l’algorithme est initialisé dans l’état $|0000001\rangle$, qui correspond au produit tensoriel des “entiers“ $|0\rangle \otimes |1\rangle$. La phase (1) correspond à l’action des portes de

Hadamard qui prépare la superposition cohérente

$$\frac{1}{2^4} \sum_{x=0}^7 |x\rangle \otimes |1\rangle$$

La troisième phase (2) correspond aux opérations d'exponentiation modulaire. L'état devient

$$(|0\rangle + |4\rangle) \otimes |1\rangle + (|1\rangle + |5\rangle) \otimes |7\rangle + (|2\rangle + |6\rangle) \otimes |4\rangle + (|3\rangle + |7\rangle) \otimes |3\rangle.$$

Enfin dans la quatrième phase (3) on applique la transformée de Fourier quantique qui donne l'état sortant

une superposition des états $|0\rangle, |2\rangle, |4\rangle, |6\rangle$ faites le calcul !

Si nous appliquons maintenant le postulat de la mesure nous trouvons $\text{Prob}(y) = 1/4$ pour $y = 0, 2, 4, 6$ et $\text{Prob}(y) = 0$ pour $y = 1, 3, 5, 7$. On observe que $M/r = 2$. Puisque $M = 2^3 = 8$ on en déduit $r = 4$ ce qui est le bon résultat.

Ces dernières remarques indiquent que lors de la lecture de l'état sortant, par les techniques illustrées dans le paragraphe précédent, nous devrions observer des raies spectrales correspondantes aux états $|0\rangle = |000\rangle$, $|2\rangle = |010\rangle$, $|4\rangle = |100\rangle$, $|6\rangle = |110\rangle$. Discutons maintenant la réalisation expérimentale proprement dite.

Celle-ci utilise une solution contenant des molécules de synthèse contenant, entre autres, 7 noyaux actifs de spin 1/2. Plus précisément il y a 2 C^{13} et 5 F^{19} . Une représentation schématique de la molécule est donnée sur la figure 8.7, avec la numérotation utilisée pour les qubits. Les fréquences de Larmor déplacées ainsi que les couplages des 7 noyaux actifs peuvent être déterminés expérimentalement et sont donnés à titre d'indication dans la table. On peut penser à chaque molécule comme à un "circuit quantique" ou du moins un substrat pour le circuit.

La figure 8.7 montre la séquence de pulses utilisée pour réaliser les portes à un qubit, les portes à deux qubits étant réalisées de façon naturelle via les couplages spin-spin. Sur cette figure les lignes de 1 à 7 représentent les 7 qubits (noyaux), l'axe horizontal représente le temps, et les barres verticales indiquent les instants auxquels agissent les pulses. Comme expliqué plus haut la durée de chaque pulse est négligeable (de l'ordre de 10^{-6} sec) par rapport aux intervalles de temps séparant les pulses (de l'ordre de 10^{-3} sec) correspondant à l'évolution naturelle. On distingue 4 phases séparées par les lignes verticales pointillées. La phase d'initialisation (0) nécessaire à la préparation de l'état initial, la phase (1) de préparation de l'état de superposition cohérente, la phase (2) qui est la plus longue (d'une durée totale de ~ 400

i	$\omega_i/2\pi$	$T_{1,i}$	$T_{2,i}$	J_{7i}	J_{6i}	J_{5i}	J_{4i}	J_{3i}	J_{2i}
1	-22052.0	5.0	1.3	-221.0	37.7	6.6	-114.3	14.5	25.16
2	489.5	13.7	1.8	18.6	-3.9	2.5	79.9	3.9	
3	25088.3	3.0	2.5	1.0	-13.5	41.6	12.9		
4	-4918.7	10.0	1.7	54.1	-5.7	2.1			
5	15186.6	2.8	1.8	19.4	59.5				
6	-4519.1	45.4	2.0	68.9					
7	4244.3	31.6	2.0						

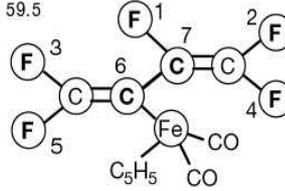


FIGURE 8.6 – Molécule de perfluobutadienyl utilisée dans la réalisation expérimentale de l’algorithme de Shor. Les moments magnétiques des noyaux numérotés de 1 à 7 correspondent aux qubits du circuit de la figure 8.7. Pour un champ magnétique de 11.7 T, les fréquences de Larmor décalées $\omega_i/2\pi$ (mesurées rapport à 470 MHz pour ^{19}F et 125 MHz pour ^{13}C) ainsi que les couplage J_{ij} sont données en Hz. Les temps de relaxation T_{i1} et T_{i2} sont donnés en sec. [source : [VSBYSC] Nature vol 414 pp.883-887 (2001)].

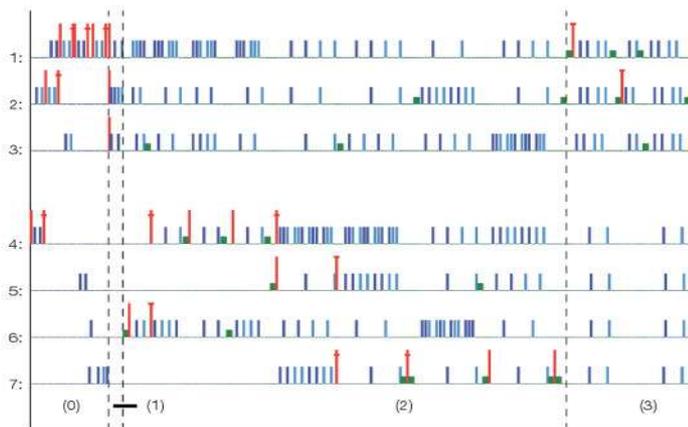


FIGURE 8.7 – Séquence temporelle des pulses de radio-fréquence agissant sur les qubits 1 à 7 de la molécule. [source : [VSBYSC] Nature vol 414 pp.883-887 (2001)].

msec) calcule l'exponentielle modulaire, et enfin la phase (3) qui effectue la QFT (d'une durée de ~ 120 msec). La durée totale de l'expérience est de 720 msec. Notons que la technique utilisée pour la préparation de l'état initial n'est pas triviale et fait partie des innovations de cette expérience. En effet, à priori l'état des 7 qubits, n'est pas l'état pur $|0000001\rangle$, mais un état de mélange thermique qui est ramené à un état "pseudo-pur" par des opérations appropriées. Cette étape constitue en fait une limitation importante pour réaliser le calcul quantique quand le nombre de qubits augmente. Nous n'en disons pas plus ici.

Donnons quelques informations supplémentaires sur les différents types de pulses utilisés. Les barres hautes rouges sont des $\pi/2$ pulses correspondant à des rotations autour des axes x positif (pas de croix), x négatif (croix inférieure), et y positif (croix supérieure). Quand ces barres sont isolées elles représentent des portes de Hadamard alors que quand elles surviennent par paires elles sont séparées par une évolution correspondant à une porte à deux qubits. Les barres bleues représentent les pulses utilisés pour la refocalisation. Ce sont des rotations d'angle π autour de l'axe x (positif \rightarrow bleu foncé; négatif \rightarrow bleu clair). Les petites barres vertes représentent des rotations autour de z .

On remarquera que la grande majorité des pulses utilisés ont trait à la refocalisation, et non pas aux portes du circuit quantique de Shor. La séquence de pulses nécessaires à la refocalisation a été calculée par simulations numériques, avant d'être implémentée dans l'expérience de RMN. De plus, un modèle de décohérence a été utilisé pour simuler la dynamique. Tous ces aspects dépassent de loin le cadre de cette introduction.

Passons finalement à l'étape finale qui consiste à lire l'état sortant des qubits. On utilise des $\pi/2$ pulses de lecture réglés sur les fréquences de résonance des 3 premiers qubits. Leurs spins basculent dans le plan xy et précessent autour de z , ce qui induit en vertu de la loi de Faraday, un signal dans la bobine. Le spectre de Fourier de ce signal est donné sur la figure 8.7. Ce spectre contient plusieurs fréquences à cause des nombreux effets de chemical shift. Néanmoins on peut immédiatement en déduire que, dans l'état sortant, le qubit 0 était dans l'état $|\uparrow\rangle$ (c.à.d $|0\rangle$). D'autre part les qubits 1 et 2 sont dans des états de superposition de $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ (c.à.d $|0\rangle$ et $|1\rangle$). On peut donc en déduire que l'état sortant était une superposition de

$$|000\rangle, |010\rangle, |100\rangle, |110\rangle.$$

Les entiers intervenant dans cette superposition sont $|0\rangle, |2\rangle, |4\rangle, |6\rangle$, comme prédit par la théorie. Cela permet de conclure que $M/r = 2$ et donc $r = 4$, puisque $M = 2^3 = 8$.

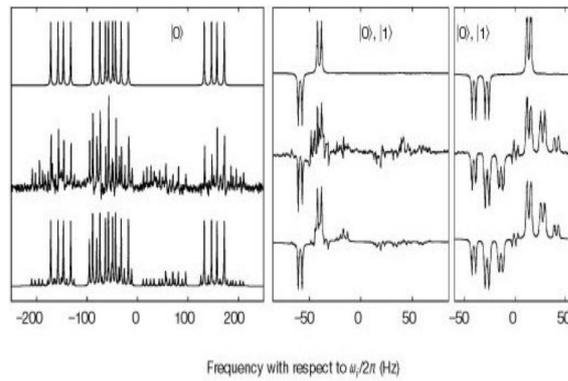


FIGURE 8.8 – Spectres theorique ideal (premiere ligne), expérimental (deuxieme ligne) et simulé avec un modèle de décohérence (troisième ligne) des trois qubits à la sortie du circuit. [source : [VSBYSC] Nature vol 414 pp.883-887 (2001)].