

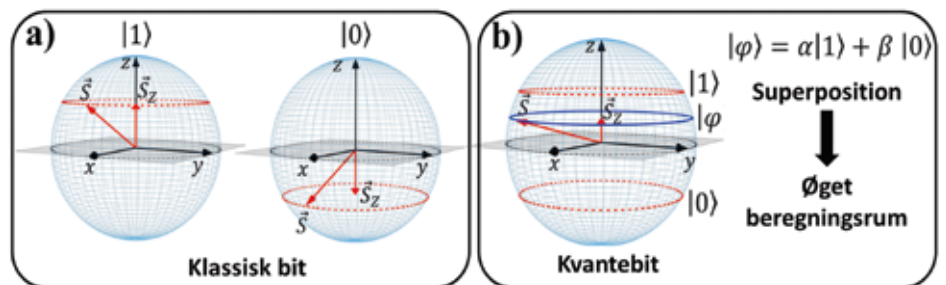
# Den molekylære kvantecomputer

Kvantecomputere tiltrækker større og større opmærksomhed. De første kvantecomputere fra Google og IBM baserer i dag deres logiske enheder på superledere. I kulissen står dog flere andre teknologier klar til at tage over i den næste fase af kvantecomputere, heriblandt molekylære komplekser.

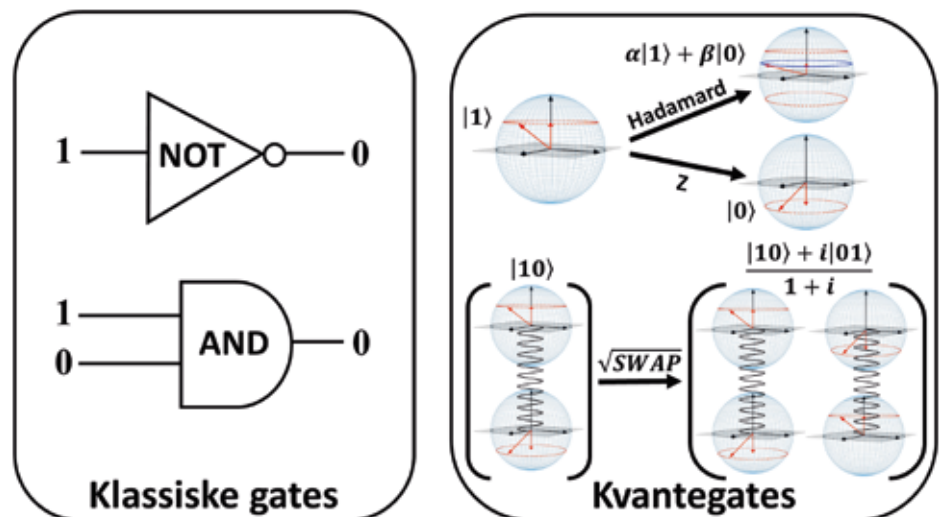
Af Christian D. Buch og Stergios Piligkos, Kemisk Institut, Københavns Universitet

Kvantemekanikken har en helt særlig betydning i Danmark på grund af det grundlæggende arbejde, som blev gjort af Niels Bohr, Werner Heisenberg og mange andre på Niels Bohr Institutet i København i løbet af 1920'erne. Dengang blev vores forståelse af kvantemekanikken grundlagt i, hvad der senere er blevet kaldt Den Første Kvanterevolution. I dag godt 100 år senere står vi midt i Den Anden Kvanterevolution. Nu handler det ikke længere om forståelsen af kvantemekanikken, men derimod om at udnytte dens gådefulde verden til at skabe nye banebrydende teknologier. En af disse er kvantecomputeren, som er et af vor tids mest ambitiøse teknologiske mål [1].

Det vakte stor opsigt, da Googles kvanteprocessor Sycamore i efteråret 2019 udførte en beregning på 200 sekunder, som ville tage den bedste supercomputer i verden flere tusinde år at gennemføre [2]. Dette var det første tegn på Quantum Advantage, altså at en kvantecomputer kan være hurtigere end en klassisk computer. Ved at bruge kvantemekaniske fænomener så som superposition og sammenfiltring (entanglement) kan en kvantecomputer løse visse beregningsproblemer mange gange hurtigere end en klassisk computer. Dette ses for eksempel i Grovers databasesøgningsalgoritme [3] og i Shors primtalsfaktoriseringalgoritme [4], hvor sidstnævnte næsten er eksponentielt hurtigere end den bedst kendte klassiske algoritme. Kvantecomputeren er stadig i sin barndom, og den bedste teknologi at basere den på er endnu ikke fundet. I denne artikel sætter vi fokus



Figur 1. a) En klassisk bit kan kun antage værdierne  $|0\rangle$  og  $|1\rangle$ . b) En kvantebit kan derimod også antage en vilkårlig superposition ( $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ) mellem "spin op" og "spin ned" tilstandene. Denne superposition leder til et øget beregningsrum for kvantecomputere. Tilstandene  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  og  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  er repræsenteret på Blochs kugleoverflader.



Figur 2. Eksempler på forskellige klassiske gates og kvantegates. Oscillationerne mellem to kvantebits i  $\sqrt{SWAP}$  gaten indikerer, at de to kvantebits er sammenfiltring (entangled).

på, hvordan molekylære komplekser kan bruges i fremtidens kvantecomputere.

## Kvantebitten - kvantecomputerens logiske enhed

Klassiske computere så som din smartphone eller bærbar er bygget op omkring et binært system. De simpleste logiske enheder i en computer er bits, hvor hver enkelt bit kan være enten 0

eller 1 (figur 1a). En kvantecomputer gør også brug af bits, de såkaldte kvantebits eller qubits fra engelsk quantum bit. Ligesom en almindelig bit kan en kvantebit antage to tilstande ( $|0\rangle$  og  $|1\rangle$ ), men her stopper ligheden med en almindelig bit også. En kvantebit kan nemlig også sættes i en vilkårlig superposition  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , hvor  $\alpha$  og  $\beta$  er komplekse koefficienter (figur 1b). Denne superpo-



Foto: Wikimedia

### Fordele ved molekylære komplekser

De kvantecomputere, som indtil videre er blevet udviklet af IBM og Google, er bygget op omkring kvantebits lavet af superledere [2]. Selvom denne type af kvantebits allerede har fundet vej til funktionelle kvantecomputere, er de ikke perfekte og ej heller molekylære systemer overlegne. Her kan for eksempel nævnes, at superledende kvantebits kun virker ved millikelvin-temperaturer, hvorimod molekylære kvantebits kan fungere ved stuetemperatur [5,9].

En stor udfordring med nutidens kvantecomputere er, hvordan man implementerer kvantefejlrettelser. Idet kvantecomputere er kvantemekaniske systemer, vil der over tid opstå tilfældige fejl i beregningerne. En måde at løse dette på er at lave klynger af flere kvantebits, som så opererer som en logisk kvantebit [10]. Dette kræver dog, at man bruger flere fysiske kvantebits for hver enkelt logisk kvantebit. Her har molekylære komplekser også en fordel, idet de ikke nødvendigvis er to-niveausystemer. Dette gælder for  $S > 1/2$  systemer og systemer med kernespin. I det molekylære kompleks Yb(trensals) har isotopen  $^{173}\text{Yb}$  for eksempel et kernespin på  $5/2$ , altså seks kernetilstande. Ved at udnytte vekselvirkningen mellem kernespinnet og elektronspinet kan fejlretningsalgoritmer indbygges i et enkelt kompleks, altså i en enkelt fysisk kvantebit i stedet for flere [11].

### Næste skridt

Der ligger stadig en del arbejde, før molekylære komplekser kan danne fundamentet for fremtidens kvantecomputere. Selvom der kan laves molvis af identiske molekyler, og en

sition er hele grundstenen i en kvantecomputer og åbner op for den øgede regnekraft i en kvantecomputer.

En klassisk computer bruger gates til at lave logiske operationer mellem sine bits. Det gælder for eksempel en NOT eller AND gate (figur 2). Det samme gør sig gældende i en kvantecomputer, hvor kvantegates udfører logiske operationer på kvantebits. Nogle af disse kvantegates har direkte klassiske pendanter, for eksempel svarer en Z gate til den klassiske NOT gate. Andre kvantegates har ikke nogen klassisk ækvivalent, dette gælder for en Hadamard eller  $\sqrt{\text{SWAP}}$  gate, som sætter en eller flere kvantebits i superposition (figur 2). Den interesse-rede læser som ønsker mere viden om kvantegates, henvises til programmet Qiskit udviklet af IBM ([www.qiskit.org](http://www.qiskit.org)).

### Molekylære komplekser som kvantebits

Som beskrevet ovenfor kræver en potentiel kvantebit først og fremmest et to-niveausystem, hvor man kan sætte den potentielle kvantebit i en superposition mellem de to tilstande. Molekylære komplekser med uparrede elektroner opfylder dette kriterie. I disse komplekser kan den uparrede elektron være enten spin op ( $|1\rangle, m_s = 1/2$ ) eller spin ned ( $|0\rangle, m_s = -1/2$ ) altså et to-niveausystem. Idet elektronens spin er en kvantemekanisk enhed, er det også muligt at sætte det i en superposition. Flere  $S = 1/2$  komplekser er blevet studeret som potentielle kvantebits. Her kan for eksempel nævnes Cu(II) og vanadyl forbindelser (figur 3a og 3b) [5-6]. Endvidere har exchangevekselvirkningssystemer så som  $\text{Cr}_7\text{Ni}$  ringkomplekser med en  $S = 1/2$  grundtilstand været undersøgt som kvantebitkandidater (figur 3c) [7]. Der er dog ikke noget strengt krav om at være et  $S = 1/2$  system for at være en kvantebit, så længe komplekset har en isoleret grunddoublet - dette kaldes et effektivt  $S = 1/2$  system. Dette gælder for eksempel Yb(trensals) ( $\text{H}_3\text{trensal} = 2,2',2''\text{-tris(salicylidenimino)triethylamin}$ ), som vi har studeret som en potentiel molekylær kvantebit (figur 3d) [8]. Selvom Yb(III) har otte energiniveauer i sin grundmultiplet, så er grunddoubletten energetisk isoleret fra de andre doubletter, og Yb(trensals) kan derfor betragtes som et to-niveausystem.

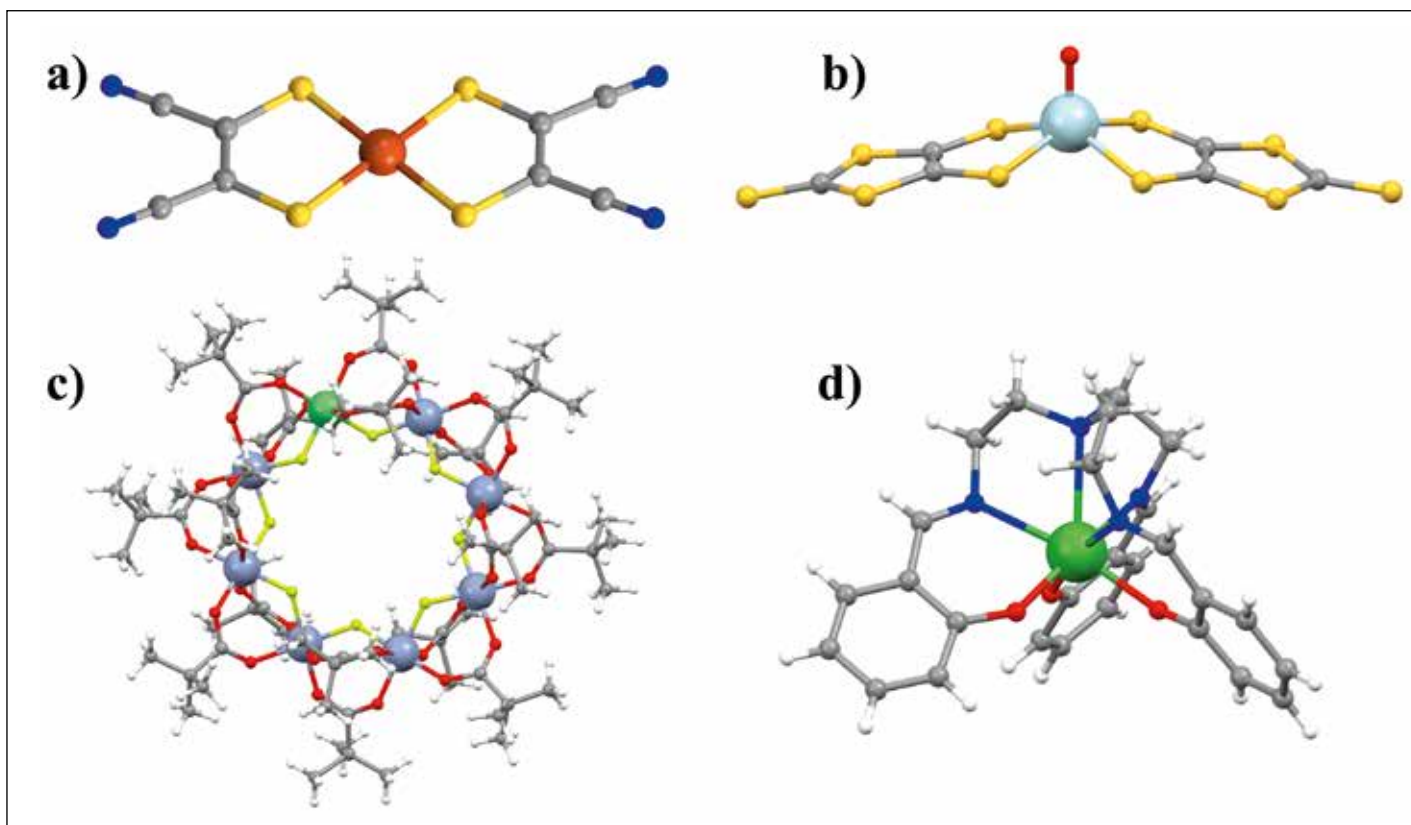
Udover at have et to-niveausystem er det selvfølgelig også vigtigt at kunne styre sin kvantebit. En kemisk kvantebit kan kontrolleres med teknikken puls elektron paramagnetisk resonans (EPR). Denne teknik gør brug af mikrobølgepulser i stedet for en kontinuert mikrobølgestråling som i c.w. EPR, og den er derfor tidsopløst. Disse mikrobølgepulser kan bruges til at udføre gateoperationer på kvantebitene. For eksempel kan en Hadamard gate på et to-niveausystem, altså det at sætte systemet i en superposition, opnås ved at give en såkaldt  $\pi/2$ -puls til systemet, mens en Z gate, altså det at flippe elektronspinet, kan opnås ved at give en  $\pi$ -puls til systemet. De resterende gates kan implementeres ved hjælp af mere komplicerede mikrobølgepulser og pulsskævner.

## OTTO - DIGITAL SERVICE FRA BUSCH

OTTO overvåger dine vakuumpumper, overalt, når som helst. Se tilstanden af din proces eller vakuumpumpens med vores digitale service. OTTO sender automatisk besked til Busch i tilfældet af forstyrrelser i din proces. **Oplev fordelene af tilstandsovervågning.**

Busch Vakuumenteknik A/S  
87 88 07 77  
info@busch.dk  
www.buschvacuum.com

**BUSCH**  
VACUUM SOLUTIONS



Figur 3. Krystalstrukturer af forskellige molekulære komplekser, som er blevet studeret som kvantebits [5-8]. Farvekodning: H, hvid; C, grå; N, blå; O, rød; S, gul; F, gulgrøn; Cu, orange; V, metalblå; Cr, lilla; Ni, lysegrøn; Yb, mørkegrøn.

kvantebit derved i princippet nemt kan skaleres op som krævet af DiVincenzokriterierne [12], så kræver det også, at hvert kompleks kan placeres ordnet, således at det kan adresseres enkeltvis og uafhængigt af naboerne. Dette er en kæmpeudfordring. Adressering og kvanteberegninger på et enkelt kompleks er blevet gjort [1,13], men opbygning af hele kredsløb med molekulære kvantebits er endnu ikke realiseret. Der arbejdes dog intenst på dette. Vi har for eksempel for nylig i samarbejde med kollegaer på Zaragoza Universitet og Parma Universitet undersøgt enkeltkrystaller af Yb(trensall) indsat i kvante-elektrodynamiske kredsløb (c-QED) [14]. Der er dog endnu ingen, som har udført kvantegateoperationer mellem molekulære kvantebits i integrerede kredsløb.

E-mail:

Stergios Piligkos: piligkos@chem.ku.dk

1. Thiele, S.; Balestro, F.; Ballou, R.; Klyatskaya, S.; Ruben, M.; Wernsdorfer, W., Electrically driven nuclear spin resonance in single-molecule magnets. *Science* **2014**, *344* (6188), 1135-8.
2. Arute, F.; Arya, K.; Babbush, R.; Bacon, D.; Bardin, J.C.; Barends, R.; Biswas, R.; Boixo, S.; Brandao, F.; Buell, D.A.; Burkett, B.; Chen, Y.; Chen, Z.; Chiaro, B.; Collins, R.; Courtney, W.; Dunsworth, A.; Farhi, E.; Foxen, B.; Fowler, A.;

- Gidney, C.; Giustina, M.; Graff, R.; Guerin, K.; Habegger, S.; Harrigan, M.P.; Hartmann, M.J.; Ho, A.; Hoffmann, M.; Huang, T.; Humble, T.S.; Isakov, S.V.; Jeffrey, E.; Jiang, Z.; Kafri, D.; Kechedzhi, K.; Kelly, J.; Klimov, P.V.; Knysh, S.; Korotkov, A.; Kostritsa, F.; Landhuis, D.; Lindmark, M.; Lucero, E.; Lyakh, D.; Mandra, S.; McClean, J.R.; McEwen, M.; Megrant, A.; Mi, X.; Michielsen, K.; Mohseni, M.; Mutus, J.; Naaman, O.; Neeley, M.; Neill, C.; Niu, M.Y.; Ostby, E.; Petukhov, A.; Platt, J.C.; Quintana, C.; Rieffel, E.G.; Roushan, P.; Rubin, N.C.; Sank, D.; Satzinger, K.J.; Smelyanskiy, V.; Sung, K.J.; Trevithick, M.D.; Vainsencher, A.; Villalonga, B.; White, T.; Yao, Z.J.; Yeh, P.; Zaleman, A.; Neven, H.; Martinis, J.M., Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature* **2019**, *574* (7779), 505-510.
3. Grover, L.K., Quantum Computers Can Search Arbitrarily Large Databases by a Single Query. *Physical Review Letters* **1997**, *79* (23), 4709-4712.
4. Shor, P.W., Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithms and Factoring. *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* **1994**.
5. Bader, K.; Dengler, D.; Lenz, S.; Endeward, B.; Jiang, S.D.; Neugebauer, P.; van Slageren, J., Room temperature quantum coherence in a potential molecular qubit. *Nat Commun* **2014**, *5*, 5304.
6. Yu, C.J.; Graham, M.J.; Zdrozny, J.M.; Niklas, J.; Krzyaniak, M.D.; Wasielewski, M.R.; Poluektov, O.G.; Freedman, D.E., Long Coherence Times in Nuclear Spin-Free Vanadyl Qubits. *J Am Chem Soc* **2016**, *138* (44), 14678-14685.

7. Ardavan, A.; Rival, O.; Morton, J.J.; Blundell, S.J.; Tyryshkin, A.M.; Timco, G.A.; Winpenny, R.E., Will spin-relaxation times in molecular magnets permit quantum information processing? *Phys Rev Lett* **2007**, *98* (5), 057201.
8. Pedersen, K.S.; Ariciu, A.M.; McAdams, S.; Weihe, H.; Bendix, J.; Tuna, F.; Piligkos, S., Toward Molecular 4f Single-Ion Magnet Qubits. *J Am Chem Soc* **2016**, *138* (18), 5801-4.
9. Atzori, M.; Tesi, L.; Morra, E.; Chiesa, M.; Sorace, L.; Sessoli, R., Room-Temperature Quantum Coherence and Rabi Oscillations in Vanadyl Phthalocyanine: Toward Multifunctional Molecular Spin Qubits. *J Am Chem Soc* **2016**, *138* (7), 2154-7.
10. Google Quantum, A.I., Suppressing quantum errors by scaling a surface code logical qubit. *Nature* **2023**, *614* (7949), 676-681.
11. Hussain, R.; Allodi, G.; Chiesa, A.; Garlatti, E.; Mitcov, D.; Konstantatos, A.; Pedersen, K.S.; De Renzi, R.; Piligkos, S.; Carretta, S., Coherent Manipulation of a Molecular Ln-Based Nuclear Qudit Coupled to an Electron Qubit. *J Am Chem Soc* **2018**, *140* (31), 9814-9818.
12. DiVincenzo, D.P., The Physical Implementation of Quantum Computation. *Fortschritte der Physik* **2000**, *48* (9-11), 771-783.
13. Vincent, R.; Klyatskaya, S.; Ruben, M.; Wernsdorfer, W.; Balestro, F., Electronic read-out of a single nuclear spin using a molecular spin transistor. *Nature* **2012**, *488* (7411), 357-60.
14. Rollano, V.; de Ory, M.C.; Buch, C.D.; Rubin-Osanz, M.; Zueco, D.; Sánchez-Azqueta, C.; Chiesa, A.; Granados, D.; Carretta, S.; Gomez, A.; Piligkos, S.; Luis, F., High cooperativity coupling to nuclear spins on a circuit quantum electrodynamics architecture. *Communications Physics* **2022**, *5* (1).