LA-UR-25-32003

用于核反应量子模拟的第一量子化映射中复合费米子态的反对称化

Ionel Stetcu*Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico 87545, USA*（日期：2025年12月19日）

我提出了一种第一量子化确定性算法，用于对空间上彼此分离、分别包含 N_T 个和 N_p 个全同费米子的靶核–弹核系统进行反对称化。该方法从两个独立反对称化的多体态的乘积构造出完全反对称的波函数，其中每个多体态都可以是斯莱特行列式的叠加。该算法采用一个迪克态辅助寄存器，以相干方式编码两个子系统之间的所有单粒子交换通道；关键的是，只需 *single-particle* 次交换操作即可生成完整的反对称结构。若额外使用 N_p 个辅助量子比特，则总共需要 $O(N_T N_p)$ 次单粒子交换，其中最多 N_p 次可并行执行。通过在 N_T 个辅助量子比特上施加 Z 个门来纳入正确的费米子相位，随后利用紧凑的受控操作序列高效地反计算辅助寄存器。这一构造为在反应和散射模拟中制备完全反对称态提供了一种非平凡且可扩展的方案，大幅拓展了第一量子化量子算法能够处理的系统范围。

arXiv:2512.16138v1 [quant-ph] 18 Dec 2025

在经典计算机上模拟核动力学的进展历来是渐进式的，只有在特定运动学区域或针对有限的少体系统时，才能实现受控近似。量子计算提供了一种颇具前景的替代方案，因为原则上它能够在求解量子多体动力学时带来指数级优势。这种优势源于量子处理器能够模拟由多体哈密顿量产生的幺正时间演化，从而以较少依赖近似的方式直接模拟核动力学。然而在实践中，即便是容错量子计算机也会引入固有误差，因此所得演化只能近似精确的幺正行为。尽管如此，量子纠错 [1–6] 和硬件保真度 [7–9] 的稳步提升增强了人们的信心：此类误差将始终处于可控范围内，从而为实现核反应的现实量子模拟铺平道路。

核动力学的量子模拟通常包含三个主要环节：(1) 态制备，即初始化量子寄存器，使其表示所关注的物理系统；(2) 时间演化，即系统在由核哈密顿量导出的幺正算符作用下演化；(3) 测量，用于提取散射振幅、跃迁概率或截面等可观测量。对于散射和反应研究而言，波函数的正确渐近行为至关重要。此时，采用第一量子化映射往往更为高效；在这种映射中，所需量子比特的数量随粒子数线性增长，而仅随可用单粒子态数对数增长。因此，第一量子化特别适合描述扩展空间体积中的反应，并提取渐近可观测量。

在反应动力学的背景下，通常需要制备两个初始多体态，一个描述靶，另一个描述弹丸；二者各自先进行内部反对称化，随后再相互反对称化，以确保完整的费米子对称性。对于费米子系统而言，态制备尤其具有挑战性，因为它需要编码满足泡利不相容原理的多体波函数。这也促使本文提出相应的算法进展，以在量子计算机上对这类复合量子态进行反对称化。该方法的另一项应用是对质子和中子进行反对称化；在这种情况下，将同位旋作为显式量子数纳入统一的费米子框架中会更为有利。

文献中已提出多种构造反对称费米子态的算法[10–13]。这些技术可用于制备两个原子核的初态，随后再通过量子相位估计或相关投影方法[14–18], 进行优化，也可结合变分技术[19–21], ，包括对称性感知拟设 [22, 23], ，以提高制备靶和弹丸的基态或低能激发态的概率。然而，在这一阶段，两个本征态的乘积在交换不同子系统中的全同费米子时并不具有反对称性。原则上，可以采用统一投影框架同时构造两个子系统；但由于它们的结构存在实际差异，这些差异会影响投影的最佳演化时间和结果概率，因此采用两步策略更为高效：先获得投影后的态，再对靶和弹丸进行反对称化。我还要指出，当两个子系统在初始时相距较远（这在反应模拟中很常见）时，完全反对称化不会改变它们的内部结构。

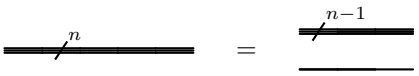
大多数现有的反对称化方案依赖于有序单粒子态 [10–12], ，其中一些方案具有概率性，

尽管成功概率可能相当高。相比之下，Rule 等人[13] 提出了一种递归确定性算法，通过受控交换操作和反计算步骤，迭代地从 N 个粒子的反对称态构建 $N-1$ 个粒子的反对称波函数，从而确保正确的反对称相位。基于测量的变体通过根据电路中测量结果进行条件相位校正，降低了电路深度。该算法适用于任意正交单粒子态，无需有序输入，且始终具有确定性，从而能够实现可扩展的费米子系统和核反应量子模拟。

在这里，我将这种方法扩展为：由两个经过反对称化的子系统的乘积构造出一个完全反对称的态，而每个子系统都可以是多个斯莱特行列式的叠加。唯一的要求是，只需检查少量量子比特，就能轻松区分这些子系统；因此，与文献 [13]，中的方法不同，该过程无需应用完整的逆单粒子制备电路。

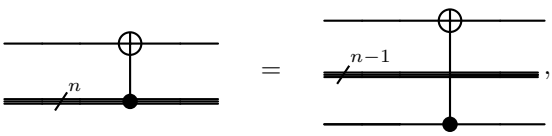
我们先假设已制备好两个初态：一个属于靶，由 N_T 个全同费米子组成；另一个属于弹丸，由 N_p 个全同费米子组成。这两个系统最初相距甚远，因此至少可以利用一个量子比特，区分属于靶和弹丸的单粒子态。

在晶格上，我们可以设想靶的质心（CoM）局域在左侧，而弹丸的质心局域在右侧，使相应的单粒子波函数在空间上充分分离。此外，可以假设用于描述晶格位置的某个量子比特，在粒子位于晶格左侧时处于状态 $|0\rangle$，在粒子位于晶格右侧时处于状态 $|1\rangle$。这样便能快速识别靶或弹丸中的核子，因为识别单粒子态过于复杂，尤其是在需要对复杂的多体波函数进行反对称化时，而且还会增加算法的复杂度。用量子电路的语言来说，这意味着对于由 n 个量子比特表示的粒子态，最后一个量子比特将被指定为控制靶或弹丸的标志。在本文中，我任意选择 $|0\rangle$ 表示粒子态属于靶，选择 $|1\rangle$ 表示粒子态属于弹丸，如下所示：



(1)

为了逆计算辅助量子比特，受粒子态控制的 NOT 操作由受该粒子态最后一个辅助量子比特控制的操作构成：



(2)

如果操作受 $|0\rangle$控制，情况也类似。粒子态之间的交换操作由相同秩的各个量子比特之间的交换操作构成。

要对组合态进行完全反对称化，必须考虑靶与弹丸之间所有可能的粒子交换，这些交换共有

$$N_{\text{perm}} = \frac{(N_T+N_p)!}{N_T!\,N_p!} = \binom{N_T+N_p}{N_p} \tag{3}$$

个不同项。

在实现用于生成全局反对称化波函数的算法之前，了解部分反对称化初态所涉及的置换类型会很有帮助。首先，有$N_T N_p$ 种可能的单粒子交换，每种交换都涉及一个来自靶的粒子和一个来自弹丸的粒子。

接下来，我们必须考虑成对粒子的交换，共有 $\binom{N_T}{2}\binom{N_p}{2}$ 项。同理，涉及三个粒子的交换会产生 $\binom{N_T}{3}\binom{N_p}{3}$项，依此类推。需要注意的是，为确保波函数在费米子交换下正确地反对称化，涉及奇数次粒子交换的置换必须带有 -1 相位因子。

假设弹丸中的粒子数少于靶中的粒子数，则完全反对称化所需的不同置换总数为

$$N_{\text{perm}} = 1 + \sum_{k=1}^{N_p} \binom{N_T}{k}\binom{N_p}{k}, \tag{4}$$

其中第一项表示未置换乘积态。

对于 $N_p = 1$ 的情况，例如中子、氘核或氚核诱导的反应（对于三离子，其中的中子在反对称化时稍微复杂一些，但下文将介绍相关算法），参考文献 [13] 中的算法可以直接推广，因为只需对单个弹丸粒子与 N_T 靶费米子进行反对称化。虽然形式上，反计算辅助量子比特需要识别与辅助寄存器纠缠的适当分量，但无需对靶应用逆态制备电路。相反，只需检查指定模拟盒右侧弹丸位置的量子比特，即可简化这一过程。因此，对于需要校正的粒子，可以在其专用量子比特上施加 Z 门，也就是说，当弹丸态被移入靶态时施加该门。

对于靶和弹丸中粒子数超过两个的情况，需要实现的置换数量会随着靶和入射粒子中的全同费米子数量迅速增加，见式（3）。因此，需要采用不同于文献 [13], 的方法，尽管我们希望保留一次只实现单粒子交换的简洁性。这可以

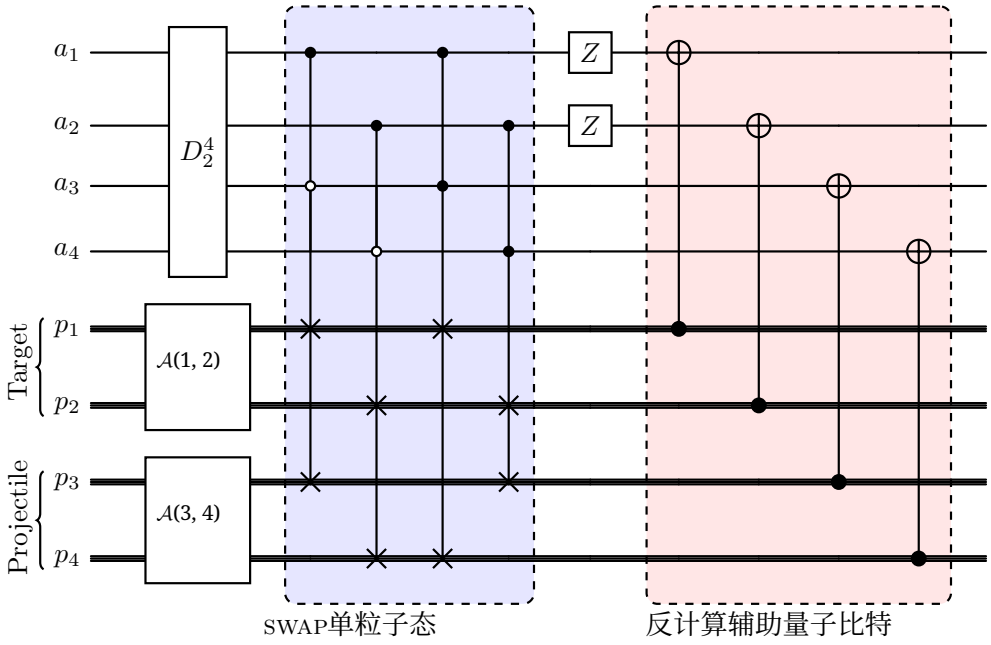


图 1. 对二粒子靶态和弹丸态进行反对称化的量子电路。从靶和弹丸各自独立反对称化的双费米子态，以及制备为迪克态 D_2^4的四个辅助量子比特出发，蓝色填充区域利用图中未显示的另外两个辅助量子比特，并行执行子系统之间的所有单粒子交换；适当的 Z 门则提供正确的反对称化相位。交换操作将弹丸态与处于状态 $|1\rangle$ 的辅助量子比特、靶态与处于状态 $|0\rangle$的辅助量子比特纠缠起来，从而生成所有所需的置换。粉色填充区域所示的反计算阶段，使用 $N_T + N_p$ 受控的 NOT 操作使辅助寄存器解纠缠。

通过使用 $N_T + N_p$ 辅助量子比特，并将其制备为迪克态 $D_{N_p}^{N_T+N_p}$ [24] （在所有恰有 N_p 个量子比特处于状态 $|1\rangle$ 的 $N_T + N_p$ 个量子比特状态中均匀叠加）。迪克态能够自然编码所有这样的配置：其中 N_p 个入射粒子可映射到 N_T+N_p 个可用位置，从而以紧凑的方式选取并并行执行所需的单粒子交换操作，而无需显式构造完整的多粒子置换集合。因此，将迪克态辅助量子比特与靶寄存器和弹丸寄存器之间的受控交换操作结合后，它便能高效选取适当的交换通道，无需为每个置换单独构造量子电路，并且显式实现的仅有单粒子交换。每个置换所对应的符号可通过对前 N_T 个辅助量子比特施加单量子比特 Z 门来轻松引入；这些辅助量子比特与靶态和弹丸态之间的交换相纠缠。随后对辅助寄存器进行反计算也很简单，因为其中仅包含 $N_T + N_p$ CNOT个量子比特。文献中已有多种高效生成迪克态的量子电路[25–28], ，使得这一方法在容错量子硬件上具有实际可行性。

图 1展示了用于对靶和弹丸进行反对称化的量子电路，它们各由两个不可区分的费米子组成。假设初始状态是靶的反对称化二体态

以及弹丸（两者都可能是斯莱特行列式的叠加），并配备四个制备为迪克态的辅助量子比特 D_2^4后，蓝色填充区域中的操作会在前两个辅助量子比特中任意一个处于状态 $|1\rangle$ 且后两个辅助量子比特中任意一个处于状态 $|0\rangle$时执行单粒子态交换。这些操作会生成三个四粒子态，其中至少有一个弹丸单粒子态与一个靶单粒子态发生了交换。最后两次交换的构造旨在避免重复前两次交换已产生的交换；换言之，第三和第四次交换仅作用于初始两次交换未生成的构型。若将这些交换分别实现为多重受控操作，所需资源将远多于另一种方案：根据 a_1 至 a_4 的状态，先翻转额外的辅助量子比特（图中未示出），如图1的受控操作所示。在这种情况下，每次交换都可由一个额外的辅助量子比特控制，随后再通过相同的多重受控操作对其进行反计算，参见文献[29]中的图 1。如果有多达 N_p 个额外辅助量子比特可用， N_p 次交换操作便可并行执行；即使可用量子比特较少，相较于完全多重受控的实现方式，仍可降低电路深度。仅作用于前两个辅助量子比特的 Z 门会产生正确的反对称化相位，因为奇数次粒子交换会产生 -1相位，而偶数次交换则产生

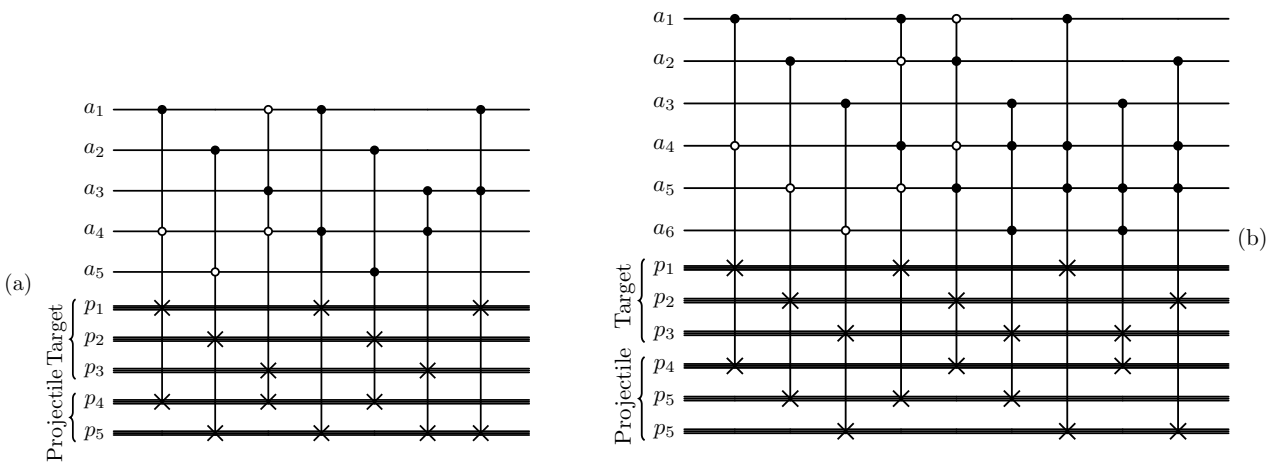


图 2. 反对称化算法为以下系统生成的单粒子交换操作：(a) 包含两个入射粒子和三个靶粒子的系统；(b) 靶和入射粒子中均包含三个粒子的系统。还可引入此处未显示的辅助量子比特，以简化多重受控交换，或允许并行执行更多交换操作。

整体相位 $+1$，这正是所需的。所有交换完成后，任何处于状态 a_i 的辅助量子比特 $|1\rangle$ 总是与占据第 i个位置的弹丸单粒子态纠缠。因此，在蓝色填充区域之后，我们已生成粒子间所有相关的置换，其中弹丸态与处于状态 $|1\rangle$的辅助量子比特相关联，而靶态与处于状态 $|0\rangle$的辅助量子比特相关联。反计算过程如图1的粉色填充区域所示；如前所述，它由 $N_T + N_p$CNOT 个操作组成。关于这些 CNOT门的定义，见式（2）。

标准交换操作分解为三个CNOT 门，而多重受控交换仅需两个 CNOT 门以及一个多重受控 NOT操作。近期研究表明，多重受控 NOT 可以在容错硬件[30]上实现高效。反过来，此处所用受控交换操作的适中成本提高了在量子硬件上进行核反应模拟的可行性。

在图 2中，我展示了在几种情况下对靶和弹丸进行反对称化所需的全部单粒子交换操作：(a) 弹丸中有两个费米子、靶中有三个费米子；(b) 靶和弹丸中各有三个全同费米子。迪克态的构造、相位的施加（这需要在最初的 Z 个辅助量子比特上执行受控 N_T 门操作），以及辅助量子比特的反计算过程未在图中展示，但它们的执行相对简单。对靶中的 N_T 个粒子和弹丸中的 N_p 个粒子进行反对称化的一般算法，需要准备处于迪克态的 $N_T + N_p$ 个辅助量子比特$D_{N_p}^{N_T+N_p}$，随后在靶与弹丸之间执行 O($N_T N_p$) 次多重受控单态交换。需要注意的是，所有交换操作都应以这样的方式设置：不会交换靶和弹丸中此前已经交换过的任何状态。正如所指出的之前， N_p 次交换操作可以并行执行，前提是能够设置一个容量足够大的额外辅助量子比特寄存器。通过在辅助寄存器上执行少量单量子比特 Z 操作来引入正确的反对称化相位，随后通过以粒子标签为条件的受控 NOT 门对辅助量子比特进行反计算。尽管该过程不会直接生成复合 k粒子置换， [见式（4），], 所有相关单粒子交换的叠加与初态的反对称结构相结合，确保最终波函数在交换任意两个全同费米子时完全反对称。在在线补充材料中，我给出了其他粒子-靶粒子对的更多量子电路 [29]。

本文提出了一种高效算法，用于在核反应模拟中，从两个独立反对称化子系统的乘积构造完全反对称的费米子态，例如靶核和入射粒子。利用迪克态紧凑地编码靶与入射粒子之间所有可能的单粒子交换，使所需的交换操作能够并行执行，并最大限度地减少需要执行的交换操作数量。当 $N_T = N_p$时，该算法恰好需要 $N_T N_p$ 次单粒子交换操作；而对于 $N_T > N_p$ ，除这一基准数量外，仅需进行相对较少的额外交换（在图 2(a) 中需要 8 次交换，而 $N_T N_p = 6$）。

该算法将迪克态辅助寄存器与靶和弹丸的单粒子态相关联。辅助量子比特决定执行哪些粒子交换，量子电路仅在这两个子系统之间执行单粒子交换操作。使用 N_p 额外的干净辅助量子比特，可使 N_p交换操作并行执行；与顺序执行的方法相比，这显著降低了量子电路的深度。

正确的反对称化相位通过在辅助寄存器上执行少量单量子比特 Z 操作来引入，随后即可高效地解纠缠辅助量子比特。这种方法无需对靶单粒子态应用逆态制备电路，进一步简化了算法。不过，我们可以设计一种反对称化[13], 算法，采用与参考文献中类似的反计算算法 N_p，即使用构造单粒子态的量子电路的逆电路。但在这种情况下，每个辅助量子比特的反计算都需要实现[13], 个逆电路。由于辅助量子比特的解纠缠是算法中开销最大的部分，因此执行并行交换所带来的益处很快就会被态制备电路（正向和逆向）的应用抵消。

该算法的并行结构使其非常适合在容错量子硬件上实现，从而能够利用简单的晶格表示，对核 [31] 反应和化学反应进行可扩展的量子模拟。本文及其配套补充材料中提供的量子电路[29] 支持靶核—弹丸反对称化，可用于模拟由中子、氘核、氚和 ^{3,4}He诱发的反应，靶核最高可达 ^{12}C。

致谢 感谢 J. Carlson 和 M. Angel 就费米子系统的反对称化进行了富有启发性的讨论，感谢 E. Rule 和 C. Johnson 对稿件提出反馈，也感谢 A. Roggero 指出了参考文献 [30]。本研究在美国能源部美国国家核安全管理局的支持下，于洛斯阿拉莫斯国家实验室开展，合同编号为 89233218CNA000001。作者衷心感谢高级模拟与计算（ASC）计划提供的支持。

[1]A. Katabarwa、K. Gratsea、A. Caesura 和 P. D. Johnson，《早期容错量子计算》，arXiv:2311.14814 [quant-ph] （2023）。[2] D.-S. Wang，《状态自适应量子纠错与容错量子计算》，arXiv: 2508 06011 。 quant-ph [ ] 2025 （ ）。[3] P. Zeng、G. Zheng、Q. Xu 和 L. Jiang，《针对错误结构定制的早期容错量子计算》，arXiv:2511.19983 [quant-ph] （2025）。[4] A. W. Senior、T. Edlich、F. J. H. Heras、L. M. Zhang、O. Higgott、J. S. Spencer、T. Applebaum、S. Blackwell、J. Ledford、A. ˇ Zemgulyt˙e、A. ˇZ´ıdek、N. Shutty、A. Cowie、Y. Li、G. Holland、P. Brooks、C. Beattie、M. Newman、A. Davies、C. Jones、S. Boixo、H. Neven 和 J. Bausch，《用于拓扑量子码的可扩展实时神经解码器》，arXiv:2512.07737 [quant-ph] （2025），支持实时性能的可扩展量子纠错神经解码。[5] D. Aasen、M. Aghaee、Z. Alam、M. Andrzejczuk、A. An- tipov、M. Astafev、L. Avilovas、A. Barzegar、B. Bauer、J. Becker、J. M. Bello-Rivas、U. Bhaskar、A. Bocharov、S. Boddapati、D. Bohn、J. Bommer、P. Bonderson、J. Borovsky、L. Bourdet、S. Boutin、T. Brown、G. Camp- bell、L. Casparis、S. Chakravarthi、R. Chao、B. J. Chap- man、S. Chatoor、A. W. Christensen、P. Codd、W. Cole、P. Cooper、F. Corsetti、A. Cui、W. van Dam、T. E. Dandachi、S. Daraeizadeh、A. Dumitrascu、A. Ekefj¨ard、S. Fallahi、L. Galletti、G. Gardner、R. Gatta、H. Gavra- novic、M. Goulding、D. Govender、F. Griggio、R. Grig- oryan、S. Grijalva、S. Gronin、J. Gukelberger、J. Haah、M. Hamdast、E. B. Hansen、M. Hastings、S. Heedt、S. Ho、J. Hogaboam、L. Holgaard、K. V. Hoogdalem、J. In- drapiromkul、H. Ingerslev、L. Ivancevic、S. Jablonski、T. J ensen、J. Jhoja、J. Jones、K. Kalashnikov、R. Kalla- her、R. Kalra、F. Karimi、T. Karzig、S. Kimes、V. Kli- uchnikov、M. E. Kloster、C. Knapp、D. Knee、J. Koski、P. Kostamo、J. Kuesel、B. Lackey、T. Laeven、J. Lai、G. de Lange、T. Larsen、J. Lee、K. Lee、G. Leum、K. Li、T. Lindemann、M. Lucas、R. Lutchyn、M. H. Madsen、N. Madulid、M. Manfra、S. B. Markussen、E. Martinez, M. Mattila, J. Mattinson, R. McNeil, A. R. Mei, R. V. Mishmash, G. Mohandas, C. Mollgaard, M. de Moor, T.Morgan, G. Moussa, A. Narla, C.Nayak, J. H. Nielsen, W. H. P. Nielsen, F. Nolet, M. Nystrom, E. O'Farrell, K. Otani, A. Paetznick, C. Papon, A. Paz, K. Peters- son, L. Petit, D. Pikulin, D. O. F. Pons, S. Quinn, M. Rajpalke, A. A. Ramirez, K. Rasmussen, D. Raz- madze, B. Reichardt, Y. Ren, K. Reneris, R. Riccomini, I. Sadovskyy, L. Sainiemi, J. C. E. Salda˜na, I. Sanlorenzo, S. Schaal, E. Schmidgall, C. Sfiligoj, M. P. da Silva, S. Singh, S. Sinha, M. Soeken, P. Sohr, T. Stanke- vic, L. Stek, P. Strøm-Hansen, E. Stuppard, A. Sun- daram, H. Suominen, J. Suter, S. Suzuki, K. Svore, S. Teicher, N. Thiyagarajah, R. Tholapi, M. Thomas, D. Tom, E. Toomey, J. Tracy, M. Troyer, M. Turley, M. D. Turner, S. Upadhyay, I. Urban, A. Vaschillo, D. Vi- azmitinov, D. Vogel, Z. Wang, J. Watson, A. Webster, J. Weston, T. Williamson, G. W. Winkler, D. J. van Wo- erkom, B. P. W¨utz, C. K. Yang, R. Yu, E. Yucelen, J. H. Zamorano, R. Zeisel, G. Zheng, J. Zilke, and A. Zimmer- man, 使用拓扑量子比特阵列实现容错量子计算的路线图, arXiv:2502.12252 [quant- ph] 10.48550/arXiv.2502.12252 (2025). [6] R. Ismail, I.-C. Chen, C. Zhao, R. Weiss, F.Liu, H. Zhou, S.-T. Wang, A. Sornborger, and M. Kornja˜ca, Transver-sal star architecture for megaquop-scale quantum simu- lation with neutral atoms, arXiv: 2509 18294 [ ] . 10 48550 2509 18294 2025 quant-ph./arXiv..(). [7] J. P. Smith, I. Lee, A. Patel, L. T. Nguyen, S. Rivera, M. J. Thompson, C. Zhao, A. Gupta, E.-J. Kim, and M. L. Roberts, High-fidelity superconducting fluxonium qubits with record single-qubit gate performance, PRX Quantum **6**,010301 (2025). [8] A. L¨oschnauer, H. E. Baker, W. Chen, L. F. Duarte, R. T. Evans, A. M. Fisher, L. Garcia, J. D. Howard, R. Ito, K. M. Johnson, S. Kaur, T. Liu, W. S. Mitchell, Q. Nguyen, M. J. Ortiz, V. Patel, E. Quinn, M. A. Rodriguez, and E. H. Smith, Scalable, high-fidelity all- electronic control of trapped-ion qubits, PRX Quantum **6**,020102 (2025).

[9] A. Salmanogli 和 H. Zandi，面向保真度与纠缠保持的量子芯片协同设计，arXiv:

2511 04194 .

[ ] 10 48550 2511 04194 2025

quant-ph . /arXiv. . ( ). [10] D. S. Abrams 和 S. Lloyd，在通用量子计算机上模拟多体费米系统，《物理评论快报》79，2586 (1997)。[11] D. W. Berry、M. Kieferov´a、A. Sc herer、Y. R. Sanders、G. H. Low、N. Wiebe、C. Gidney 和 R. Babbush，改进制备费米子哈密顿量本征态的技术，npj Quantum Information 4，22 (2018)。[12] R. Babbush、W. J. Huggins、D. W. Berry、S. F. Ung、A. Zhao、D. R. Reichman、H. Neven、A. D. Baczewski 和 J. Lee，精确电子动力学的量子模拟可能比经典平均场方法更高效，《自然·通讯》 **14**, 4058 2023 2301 01203

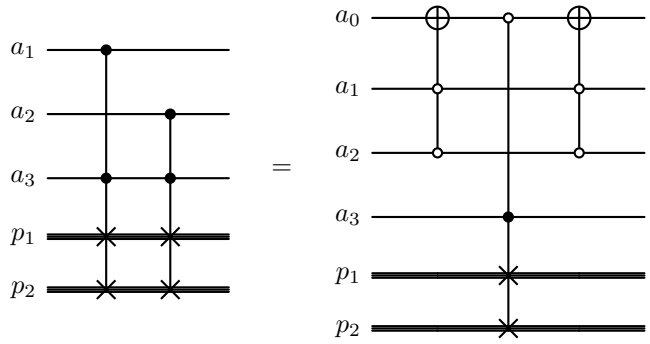
[ ]

( )，arXiv: . quant-ph . [13] E. Rule、I. A. Chernyshev、I. Stetcu、J. Carlson 和 R. Weiss，用于在第一量子化映射中构造反对称费米子态的递归算法，arXiv:2509.07279 10.48550/arXiv.2509.07279 (2025)。[14] A. Y. Kitaev，量子测量与阿贝尔稳定子问题，arXiv 预印本 quant-ph/9511026 (1995)，相位估计算法子程序的原始表述。[15] H. Ni、H. Li 和 L. Ying，关于低电路深度量子相位估计算法，《Quantum》7，1165 (2023)。[16] Y. Ge、J. Tura 和 J. I. Cirac，用更少量子比特加速基态制备并实现高精度基态能量估计，《数学物理学杂志》60，022202 2019( )。[17] T. Kosugi、Y. Nishiya、H. Nishi 和 Y.-i. Matsushita，利用单个辅助量子比特，通过正向和反向实时间演化实现虚时间演化：用于量子化学的第一量子化本征求解算法，《物理评论研究》4，033121 (2022)。[18] I. Stetcu、A. Baroni 和 J. Carlson，量子计算机上态制备的投影算法，《物理评论 C》108，L031306 (2023)。[19] H. R. Grimsley、S. E. Economou、E. Barnes 和 N. J. Mayhall，用于在量子计算机上精确分子模拟的自适应变分算法，《自然·通讯》10，3007 (2019)。[20] H. L. Tang、V. O. Shkolnikov、G. S. Barron、H. R. Grimsley、N. J. Mayhall、E. Barnes 和 S. E. Economou，qubit-adapt-vqe：一种用于在量子处理器上构造硬件高效 ans¨atze 的自适应算法，PRX Quantum 2, 020310 (2021). [21] H. R. Grimsley、D. Claudino、S. E. Economou、E. Barnes 和 N. J. Mayhall，《自适应的、针对问题定制的变分量子本征求解器可缓解粗糙的参数景观和贫瘠高原》，npj Quantum Information 9, 19 (2023). [22] J. Gibbs、Z. Holmes 和 P. Stevenson，《利用核哈密顿量中的对称性进行基态制备》，Quantum Machine Intelligence 7, 14 (2025). [23] I. Mih´alikov´a、J. Carlson、D. Neill 和 I. Stetcu，《态制备与对称性》，arXiv:2510 06702 10 48550 2510 06702 2025 . . / . ( ). [24] R. H. Dicke，《自发辐射过程中的相干性》，Physical Review 93, 99 (1954). [25] A. B¨artschi 和 S. Eidenbenz，《确定性制备迪克态》，载于 *Fundamentals of Computation Theory* ，Lecture Notes in Computer Science，第 11651 卷（Springer, 2019），第 126–139 页。[26] C. S. Mukherjee、S. Maitra、V. Gaurav 和 D. Roy，《关于在量子计算机上实际制备迪克态》，arXiv 预印本 arXiv:2007.01681 (2020)，arXiv:2007.01681 [quant-ph]。[27] A. B¨artschi 和 S. Eidenbenz，《用于制备迪克态的短深度电路》，载于 *2022 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)* (2022)，第 87–96 页。[28] P. Yuan 和 S. Zhang，《用于确定性迪克态制备的深度高效量子电路综合》，arXiv 预印本 arXiv:2505.15413 (2025)，arXiv:2505.15413 [quant-ph].[29] 展示非重叠交换操作并行化的补充在线材料，以及针对靶中涉及两个全同费米子的其他示例实现反对称化量子电路的材料。[30] D. Gosset、R. Kothari 和 C. Zhang，《使用指数级更少 T 门的多量子比特 Toffoli 门》，，arXiv:2510.07223 (2025)，arXiv:2510.07223 [quant-ph]。[31] E. Rule、I. Stetcu 和 J. Carlson，《面向量子计算的反应含时波包方法》(2025)，准备中。

一阶量子化映射中用于核反应量子模拟的复合费米子态反对称化（在线补充材料）

Ionel Stetcu*Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico 87545, USA*

展示不重叠交换并行化的在线补充材料，以及针对靶中含有两个全同费米子的其他示例实现反对称化量子电路的方法。



(1)

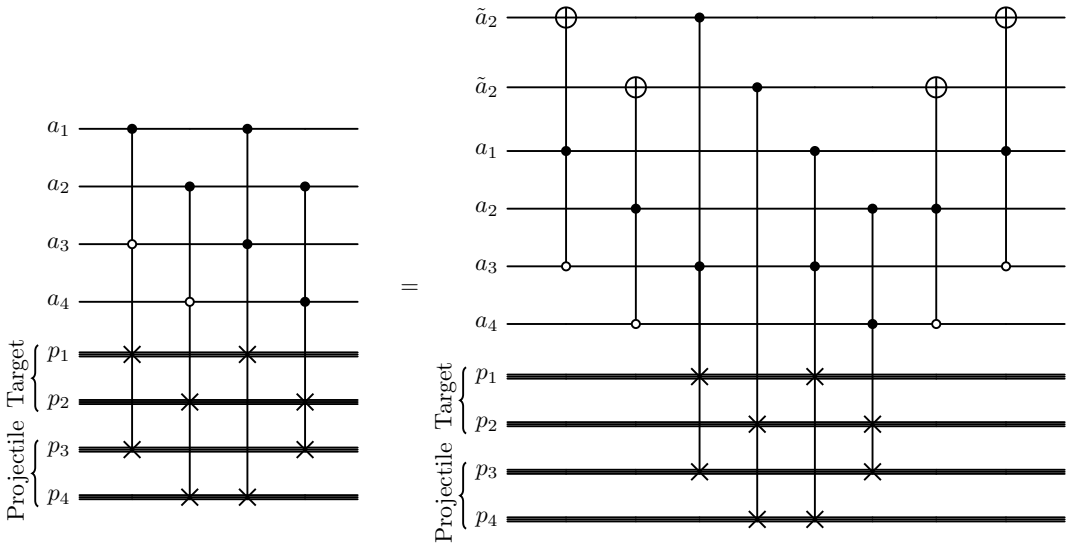


图 1. 借助两个额外的辅助量子比特，对正文图 1 中的交换操作进行并行化；最后两个多重受控 NOT 门会将其反计算。相同类型的操作可用于并行化正文图 2(a) 及图2 和3中的交换对，也可借助三个额外的辅助量子比特并行化图 2(b) 中的三重交换。

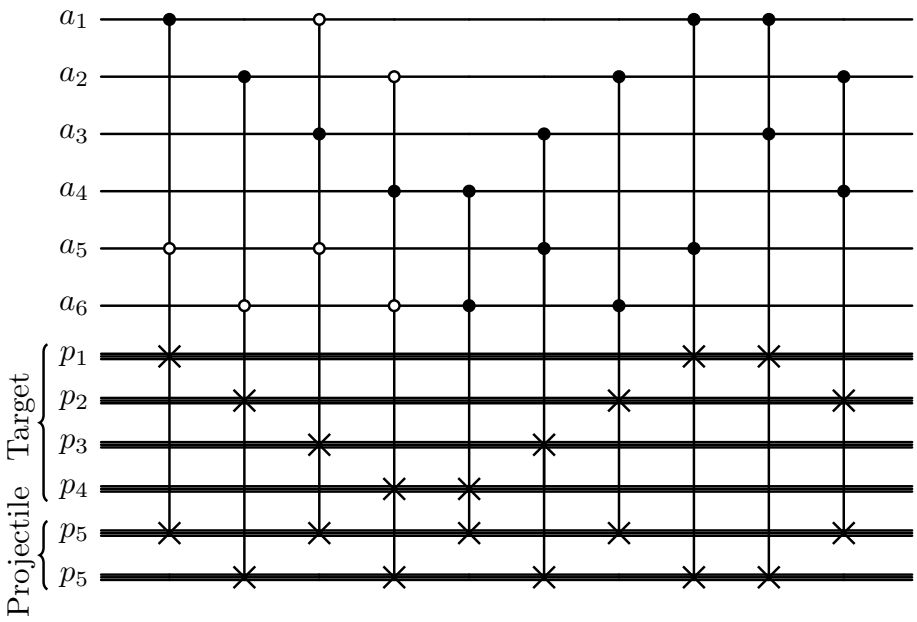


图 2. 反对称化算法为包含两个入射粒子和四个靶粒子的系统生成的单粒子交换操作。如正文所述并在图 1中所示，按照图中所示的顺序，每次可并行执行前三对交换；而交换 7 和 10 可根据式（1）合并为一次交换操作，但需要额外的辅助量子比特（交换 8 和 9 也同样如此：可以重复使用交换 7 和 10 所用的辅助量子比特，也可以借助另一个辅助量子比特并行执行）。

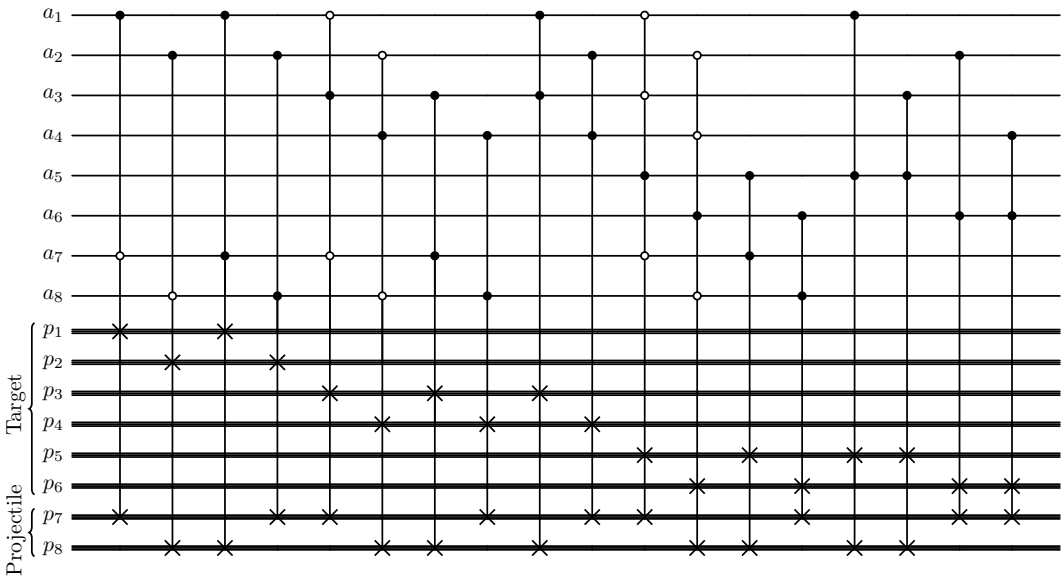


图 3. 与图 2相同，但靶中有六个全同费米子。最后两对交换也可根据式（1）合并；所有不涉及重叠交换的两次交换均可并行执行，如图 1所示。