arXiv:2603.02387v1 [quant-ph] 2 Mar 2026

# 利用受驱动的两比特和三比特自旋链实现 Barenco 门

Rafael Vieira[1†] 和 Edgard P. M. Amorim[1*†]

[1*]圣卡塔琳娜州立大学物理系，巴西圣卡塔琳娜州若因维利，89219-710。

*通讯作者。电子邮箱：edgard.amorim@udesc.br；贡献作者：rafael.vieira1989@edu.udesc.br；

†这些作者对本研究贡献相同。

**摘要**

我们提出了一种利用短驱动自旋链实现 Barenco 型多量子比特受控门的协议。从在末端自旋上施加横向驱动的伊辛相互作用出发，我们构造了一个有效的两量子比特哈密顿量，其时间演化可实现 Barenco 门 $\boldsymbol{V_2}(\varphi,\ \omega,\ \phi)$，尤其是 CNOT 门。随后，我们将这一构造扩展至三量子比特 $\boldsymbol{XXZ}$ 自旋链，以实现三量子比特 Barenco 门 $\boldsymbol{V_3}(\varphi,\ \omega,\ \phi)$，其中包括作为特例的 Toffoli 门。推导过程完全采用解析方法：我们依次进行一系列幺正变换，识别解耦子空间，并应用旋波近似以获得简洁的有效哈密顿量。我们推导出关于耦合强度和驱动参数的明确条件，给出各相关子空间中时间演化算符的闭式表达式，并利用算符保真度表征实现质量。数值模拟表明，该协议在广泛的参数范围内均能达到较高的保真度，展现出良好的鲁棒性，适用于自旋链平台上的量子信息处理。

**关键词：**量子门、Barenco 门、Toffoli 门、自旋链

## 1 引言

量子技术关键依赖于以可控且可扩展的方式实现高保真度少量子比特门的能力[1]。在标准电路模型中，

普适性可通过任意单量子比特旋转以及单个非平凡双量子比特门实现，例如受控非（CNOT）门 [2]。然而，许多算法和纠错码受益于多量子比特受控操作，例如三量子比特Toffoli门，这些操作仅在完整希尔伯特空间的一个小子空间上非平凡地起作用。

Barenco [3] 提出了一类特别方便的多量子比特受控门 $V_N(\varphi,\ \omega,\ \phi)$，其中 $N-1$ 个控制量子比特有条件地驱动单个目标量子比特，使其执行一般的单量子比特旋转。通过选择适当的实参数（$\varphi,\ \omega,\ \phi$），这一门族可以实现 CNOT 和托佛利门等标准门 [3–6]。由于具有可调性和简单的代数结构，Barenco 门是量子算法和量子模拟器的天然构建模块 [7, 8]。

从物理角度来看，短自旋链和长自旋链都是实现量子态传输、纠缠分发和门操作的多功能平台 [9–17]。具有伊辛型或 $XXZ$ 型相互作用的自旋-$\frac{1}{2}$ 链已在多种架构中实现，包括囚禁离子 [18–21], 、超导量子比特 [22, 23], 、量子点 [24, 25] ，以及光晶格中的冷原子 [26]。这些系统天然支持局域控制场，可通过驱动选定的自旋来设计有效的少量子比特门 [27, 28]。在此背景下，具有最近邻耦合、由驱动哈密顿量描述的双量子比特和三量子比特短自旋链，与当前实验平台直接兼容，适合实现 Barenco、CNOT 和托佛利门等双量子比特或三量子比特受控门操作。

在此基础上，驱动自旋链成为实现多量子比特条件操作的一种自然且灵活的平台。具体而言，Barenco 门对应于作用在单个目标量子比特上的受控幺正算符，其中任意的 $SU(2)$ 变换取决于 $N-1$ 个控制量子比特 [3] 的状态。与通常通过分解为多个基本双量子比特门来实现的标准方法不同，这类方法在执行条件 $SU(2)$ 操作时通常会产生显著的额外开销；我们的协议则在哈密顿量层面直接实现 Barenco 门，从而避免显式的门分解，并显著降低有效电路深度。

本文展示了如何利用由两个和三个量子比特组成的驱动自旋链实现 Barenco门。对于两个量子比特的情形，我们考虑量子比特之间的伊辛相互作用，以及作用于第二个自旋的时变横向场。对于三个量子比特的情形，我们将前两个自旋之间的 $XXZ$ 相互作用与第二个和第三个自旋之间的驱动伊辛耦合结合起来。在这两种情况下，我们都确定相关子空间，变换到便于处理的旋转参考系，并应用旋转波近似，推导出可直接实现 Barenco 门的有效哈密顿量。我们得到了明确的参数约束，其中包括三量子比特情形下交换耦合 $J$ 与伊辛耦合 $\beta$ 之间的关系。

本文结构安排如下。在第 2 节中，我们回顾 Barenco 门的定义，介绍本协议所用的自旋链哈密顿量，并定义用于量化实现质量的算符保真度。在第 3 节中，我们给出主要的解析结果：首先构造双量子比特 Barenco 门（包括 CNOT），随后将该协议扩展至三个量子比特（包括托佛利门）。我们还讨论参数约束，以及无序条件下有效动力学的结构。第 4 节总结我们的研究结果，并展望可能的扩展方向。

## 2 协议背景

本节将建立本协议的数学基础。首先，我们重新介绍 Barenco 门及其矩阵表示。接着，我们介绍用于实现门动力学的受驱动伊辛自旋链哈密顿量，并定义用于表示耦合和驱动的无量纲参数。最后，我们说明作为评价指标的算符保真度，用以量化实际实现的演化与目标 Barenco 操作之间的接近程度。

### 2.1 Barenco 门

量子逻辑电路由作用于任意数量的量子比特组成的寄存器上的量子门构成 $N$ 量子比特 [2]。1995 年，Barenco [3]提出了一族多量子比特受控门，其中 $N^{\text{th}}$ 量子比特的状态根据前 $N-1$ 个量子比特的联合状态进行条件变换。在合适的计算基下，Barenco 门的矩阵形式为

$$V_N(\varphi,\omega,\phi)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\omega}\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) & -ie^{i(\omega-\phi)}\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \\ 0 & 0 & 0 & -ie^{i(\omega+\phi)}\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) & e^{i\omega}\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \end{pmatrix}, \tag{1}$$

其中 $\varphi$、$\omega$ 和 $\phi$ 为实参数。如果前 $N-1$ 个量子比特处于状态 $|\downarrow\downarrow\ldots\downarrow\rangle$，则 $N^{\text{th}}$（目标端）量子比特将在布洛赫球上发生旋转，其振幅和相位由（$\varphi$，$\omega$，$\phi$）决定。选择合适的参数，例如可得到二量子比特 CNOT 门和三量子比特 Toffoli 门 [3–5]。特别地，当 $\varphi=\pi$、$\omega=\pi/2$ 和 $\phi=0$ 时，可得到 Toffoli 门。

### 2.2 驱动哈密顿量

我们协议的基本构件是一个伊辛自旋链，在最后一个自旋上施加局域含时横向驱动。对于一个 $N$ 比特链，我们考虑

$$H_N^{\text{drive}}=\beta\,\sigma_{N-1}^z\sigma_N^z+\alpha\,\sigma_N^z+\frac{\varphi A}{\pi}\cos\left(\frac{2(\beta-\alpha)t}{\hbar}-\phi\right)\sigma_N^x, \tag{2}$$

其中，$\sigma_j^x$ 和 $\sigma_j^z$ 是作用于量子比特 $j$上的泡利算符，$\alpha$ 和 $\beta$ 是静态耦合参数，$A$ 是能量尺度，最后一项描述的是施加在自旋 $N^{\text{th}}$ 上的横向振荡磁场。驱动频率选为与静态部分中相关本征态之间的能量差共振。

## 2.3 无量纲参数

引入无量纲时间会很方便

$$\tau = \frac{At}{\hbar}, \tag{3}$$

因此预期的门时间将恰好为 $\tau = \pi$。我们还设定

$$\alpha = mA, \qquad \beta = kA, \qquad m, k \in \mathbb{Z}, \tag{4}$$

并在需要时记作 $J = \gamma A$ 。全文中我们假设

$$0 \le \varphi \le \pi, \qquad \alpha > \varphi, \qquad |k - m| > 1, \tag{5}$$

从而使所采用的旋波近似（RWA） [29] 在下文中是合理的。

用 $\tau$ 表示时，含时驱动可方便地写为

$$\Omega(\tau) = \frac{\varphi A}{\pi} \cos(2(k-m)\tau - \phi)\,, \tag{6}$$

并将N量子比特哈密顿量表示为静态部分 $H_{NQ}^{(0)}$ 加上一项驱动，

$$H(t) = H_{NQ}^{(0)} + \Omega(\tau)\,\hat{V}, \tag{7}$$

$\hat{}$ 用一个简单的算符 $V$ 指定驱动的是哪个自旋。

## 2.4 量子算符保真度

为了量化物理实现的幺正变换 $U$ 与作用于维数为 $D = 2^N$ 的希尔伯特空间上的目标酉算符 $U_0$ 在纯输入态上的接近程度，一个自然的度量是参考文献 [30] 中提出的平均保真度：对所有纯输入态 $|\psi\rangle$ 均匀取平均，比较输出态 $U|\psi\rangle$ 和 $U_0|\psi\rangle$。

$$F = \frac{|\mathrm{Tr}(M)|^2 + \mathrm{Tr}\big(MM^\dagger\big)}{D(D+1)}, \tag{8}$$

其中 $M = U_0^\dagger U$。由于 $U$和 $U_0$是幺正算符，我们得到 $\mathrm{Tr}\big(MM^\dagger\big) = D$，并可将保真度重写为 $F = (Df+1)/(D+1)$，其中 $f = |\mathrm{Tr}(M)|^2/D^2$且 $0 \le f \le 1$ [31]。因此，根据构造，$1/(D+1) \le F \le 1$。当且仅当 $U$和 $U_0$至多相差一个全局相位时，才会达到 $F = 1$；而 $F = 1/(D+1)$对应于 $U$和 $U_0$在纯输入态上平均而言最大程度可区分的情形。下文中，$U_0$表示理想的 Barenco 算符 $V_N(\varphi,\ \omega,\ \phi)$，$U$表示在选定门时间下由自旋链哈密顿量生成的时间演化算符。全文中，我们忽略所有计算基态共有的整体全局相位，因为它们不会产生任何物理效应。

# 3 结果

本节将介绍我们的主要解析结果。我们首先从驱动伊辛链构造双量子比特 Barenco 门，然后利用 $XXZ$ 相互作用，并在最后一个自旋上采用相同的驱动结构，将该协议扩展至三个量子比特。

## 3.1 双量子比特 Barenco 门的实现

我们考虑一条双自旋链，其中控制端与目标量子比特之间存在 $ZZ$ 耦合，而只有目标量子比特受到横向驱动。在合适的旋转参考系中，系统动力学分解为两个由控制端状态决定的独立 $2\times 2$ 区块；其中一个区块处于空闲状态（仅差一个全局相位），另一个则经历受驱动的拉比旋转。通过匹配驱动振幅、相位和持续时间，即可在固定门时间内实现 Barenco 门 $V_2(\varphi,\ \omega,\ \phi)$；我们通过算符保真度将其与理想形式进行基准比较。计算结果如下。

### 3.1.1 模型哈密顿量

对于两个量子比特，我们考虑如下哈密顿量：

$$\begin{aligned} H &= \frac{\omega A}{2\pi}\,\sigma_1^z + H_2^{\mathrm{drive}} \\ &= \frac{\omega A}{2\pi}\,\sigma_1^z + \beta\,\sigma_1^z\sigma_2^z + \alpha\,\sigma_2^z + \frac{\varphi A}{\pi}\cos\!\left(\frac{2(\beta-\alpha)t}{\hbar} - \phi\right)\sigma_2^x. \end{aligned} \tag{9}$$

第一项是量子比特 1 上的局部 $z$ 场，接下来的两项描述静态伊辛耦合和量子比特 2 上的 $z$ 场，最后一项是作用于第二个量子比特的横向驱动。

使用方程（$\tau$）中引入的无量纲时间3，驱动可写为$\Omega(\tau)$，如方程（6）所示。在计算基 $\{|{\downarrow\downarrow}\rangle, |{\downarrow\uparrow}\rangle, |{\uparrow\downarrow}\rangle, |{\uparrow\uparrow}\rangle\}$下，方便的写法为

$$H_{2\mathrm{Q}}(\tau) = H_{2\mathrm{Q}}^{(0)} + \Omega(\tau)\,(\sigma_x \oplus \sigma_x), \tag{10}$$

其中静态部分为

$$H_{2\mathrm{Q}}^{(0)} = \mathrm{diag}\left(\alpha+\beta+\frac{\omega A}{2\pi}, -\alpha-\beta+\frac{\omega A}{2\pi}, \alpha-\beta-\frac{\omega A}{\pi}, -\alpha+\beta-\frac{\omega A}{\pi}\right), \tag{11}$$

and

$$\sigma_x \oplus \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{12}$$

### 3.1.2 旋转参考系与块结构

为消除静态 $z$ 场导致的平凡单量子比特相位，我们执行含时幺正变换

$$H_{2\mathrm{Q}}(\tau) = \hat{U}(\tau)\,\mathcal{H}_{2\mathrm{Q}}(\tau)\,\hat{U}^{\dagger}(\tau) - i\hbar\,\frac{d\hat{U}(\tau)}{dt}\,\hat{U}^{\dagger}(\tau), \tag{13}$$

with

$$\hat{U}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\omega A}{2\pi}\right)t}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\frac{\omega A t}{2\pi\hbar}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\frac{\omega A t}{2\pi\hbar}} \end{pmatrix}. \tag{14}$$

在此旋转参考系中，哈密顿量取块对角形式

$$H_{2\mathrm{Q}}(\tau) = H_{\mathrm{upper}}(\tau) \oplus H_{\mathrm{lower}}(\tau), \tag{15}$$

其中

$$H_{\mathrm{upper}}(\tau) = \begin{pmatrix} \alpha+\beta & \Omega(\tau) \\ \Omega(\tau) & -\alpha-\beta \end{pmatrix},\ H_{\mathrm{lower}}(\tau) = \begin{pmatrix} \alpha-\beta-\dfrac{\omega A}{\pi} & \Omega(\tau) \\ \Omega(\tau) & -\alpha+\beta-\dfrac{\omega A}{\pi} \end{pmatrix}, \tag{16}$$

并且我们回顾

$$\Omega(\tau) = \frac{\varphi A}{\pi}\cos(2(k-m)\tau - \phi)\,. \tag{17}$$

块 $H_{\mathrm{upper}}(\tau)$ 作用于子空间

$$\mathcal{H}_{\mathrm{upper}} = \mathrm{span}\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}, \tag{18}$$

而 $H_{\mathrm{lower}}(\tau)$ 作用于

$$\mathcal{H}_{\mathrm{lower}} = \mathrm{span}\{|\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}. \tag{19}$$

这种分离将计算相关子空间隔离开来，并使有效动力学精确可解。

### 3.1.3 有效动力学：上块

我们首先考虑 $H_{\mathrm{upper}}(\tau)$。写出 $\cos\theta = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta})$，并引入

$$\theta(\tau) = 2(k-m)\tau - \phi, \tag{20}$$

我们进一步施加一个幺正变换

$$\hat{U}_1(t) = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\beta)t/\hbar} & 0 \\ 0 & e^{-i(\alpha+\beta)t/\hbar} \end{pmatrix} \tag{21}$$

以消除 $H_{\mathrm{upper}}(\tau)$ 中的静态对角项。在这个相互作用绘景中，变换哈密顿量包含与 $e^{\pm i(2(\beta-\alpha)\pm 2(\alpha+\beta))t/\hbar}$ 成正比的快速振荡项；当满足方程（5）中的旋波近似条件时，这些项的平均值为零。仅保留慢变贡献后，[29, 32], 上块的有效哈密顿量化为单位算符的倍数，仅产生一个全局相位。因此，我们取

$$\hat{H}^{(\mathrm{eff})}_{\mathrm{upper}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{22}$$

因此

$$U_{\mathrm{upper}}(t) = e^{-i\hat{H}^{(\mathrm{eff})}_{\mathrm{upper}}t/\hbar} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{23}$$

因此，在此参考系中，第一个量子比特处于 $|\uparrow\rangle$ 的子空间基本上是冻结的。

### 3.1.4 有效动力学：下块

非平凡动力学出现在下块 $H_{\mathrm{lower}}(\tau)$ 中。我们施加幺正变换

$$\hat{U}_3(t) = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha-\beta)t/\hbar} & 0 \\ 0 & e^{-i(\alpha-\beta)t/\hbar} \end{pmatrix} e^{-i\frac{\omega A}{\pi\hbar}t} \tag{24}$$

以消除（16）中的对角项。在相应的相互作用绘景中，我们得到

$$\hat{H}^{(\mathrm{trans})}_{\mathrm{lower}}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{\varphi A}{2\pi}\left(e^{i\frac{4(\beta-\alpha)t}{\hbar}}e^{-i\phi} + e^{i\phi}\right) \\ \dfrac{\varphi A}{2\pi}\left(e^{-i\frac{4(\beta-\alpha)t}{\hbar}}e^{i\phi} + e^{-i\phi}\right) & 0 \end{pmatrix}. \tag{25}$$

在旋波近似（RWA）下忽略快速振荡项 $e^{\pm i4(\beta-\alpha)t/\hbar}$，我们得到有效哈密顿量

$$\hat{H}^{(\mathrm{eff})}_{\mathrm{lower}} = \frac{\varphi A}{2\pi}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} = \frac{\varphi A}{2\pi}\left(\cos\phi\,\sigma_x + \sin\phi\,\sigma_y\right), \tag{26}$$

其生成绕布洛赫球赤道平面内某一轴的旋转。相应的时间演化算符为

$$e^{-i\hat{H}^{(\mathrm{eff})}_{\mathrm{lower}}t/\hbar} = \begin{pmatrix} \cos\left(\dfrac{A\varphi t}{2\pi\hbar}\right) & -ie^{-i\phi}\sin\left(\dfrac{A\varphi t}{2\pi\hbar}\right) \\ -ie^{i\phi}\sin\left(\dfrac{A\varphi t}{2\pi\hbar}\right) & \cos\left(\dfrac{A\varphi t}{2\pi\hbar}\right) \end{pmatrix}. \tag{27}$$

这是一个围绕赤道轴 $\boldsymbol{n} = (\cos\,\phi,\ \sin\,\phi,\ 0)$ 以角频率 $\varphi A/(2\pi\hbar)$ 进行的通用 $SU(2)$ 旋转。

变换回原始旋转参考系后，下方块中的演化算符为

$$U_{\text{lower}}(t)=e^{i\frac{\omega At}{\pi\hbar}}\begin{pmatrix} e^{i\frac{(\alpha-\beta)t}{\hbar}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{(\alpha-\beta)t}{\hbar}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\left(\dfrac{A\varphi t}{2\pi\hbar}\right) & -ie^{-i\phi}\sin\left(\dfrac{A\varphi t}{2\pi\hbar}\right) \\ -ie^{i\phi}\sin\left(\dfrac{A\varphi t}{2\pi\hbar}\right) & \cos\left(\dfrac{A\varphi t}{2\pi\hbar}\right) \end{pmatrix}. \tag{28}$$

### 3.1.5 门时间与 Barenco 算符

现在我们选择门时间

$$\tau_{\text{g}}=\frac{At_{\text{g}}}{\hbar}=\pi, \qquad \Rightarrow \qquad t_{\text{g}}=\frac{\pi\hbar}{A}. \tag{29}$$

利用 $\alpha=mA$ 和 $\beta=kA$ 以及 $m,k\in\mathbb{Z}$，我们有

$$e^{i(\alpha-\beta)t_{\text{g}}/\hbar}=e^{i(m-k)\pi}=(-1)^{m-k}, \qquad e^{i\omega At_{\text{g}}/(\pi\hbar)}=e^{i\omega}. \tag{30}$$

忽略一个全局相位 $(-1)^{m-k}$后，$U_{\text{lower}}(t_{\text{g}})$ 在低能子空间上的作用变为

$$U_{\text{lower}}(t_{\text{g}})=\begin{pmatrix} e^{i\omega}\cos\left(\dfrac{\varphi}{2}\right) & -ie^{i(\omega+\phi)}\sin\left(\dfrac{\varphi}{2}\right) \\ -ie^{i(\omega-\phi)}\sin\left(\dfrac{\varphi}{2}\right) & e^{i\omega}\cos\left(\dfrac{\varphi}{2}\right) \end{pmatrix}. \tag{31}$$

由于 $U_{\text{upper}}(t_{\text{g}})=\mathbb{1}_2$，计算基中的完整双量子比特演化算符与双量子比特 Barenco 门 $V_2(\varphi,\omega,\phi)$ 一致：

$$U(t_{\text{g}})=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\omega}\cos\left(\dfrac{\varphi}{2}\right) & -ie^{i(\omega+\phi)}\sin\left(\dfrac{\varphi}{2}\right) \\ 0 & 0 & -ie^{i(\omega-\phi)}\sin\left(\dfrac{\varphi}{2}\right) & e^{i\omega}\cos\left(\dfrac{\varphi}{2}\right) \end{pmatrix}. \tag{32}$$

### 3.1.6 示例与补充说明

例如，选择

$$\omega=\frac{\pi}{2}, \qquad \varphi=\pi, \qquad \phi=0, \tag{33}$$

我们得到以第一个量子比特为控制端、第二个量子比特为目标端的 CNOT 门。更一般地，式（26）表明，下块中的有效哈密顿量实现了绕赤道平面内某一轴旋转 $\varphi$角；相位 $\phi$ 确定了 $x$–$y$ 平面内的旋转轴，而 $\omega$ 则设定了目标量子比特的整体 $z$相位。因此，该协议实现了具有三个可调参数的受控$SU(2)$ 旋转，恰好与 Barenco 族相符。

## 3.2 三量子比特 Barenco 门的实现

现在，我们将前述构造推广到三个量子比特。前两个量子比特通过 $XXZ$ 相互作用耦合，并受到相同的局域 $z$ 场作用；第二和第三个量子比特则通过式（2）中的受驱伊辛哈密顿量耦合。

### 3.2.1 前两个量子比特之间的 XXZ 门

我们考虑以下哈密顿量 $XXZ$

$$H_{XXZ} = \frac{J}{2}\left[\sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y + \left(1 - \frac{\omega A}{2\pi J}\right)\sigma_1^z\sigma_2^z\right] + \frac{\omega A}{4\pi}\left(\sigma_1^z + \sigma_2^z\right), \tag{34}$$

其中， $J$ 是交换耦合。如果演化时间满足

$$\frac{Jt}{\hbar} = n\pi, \qquad n \in \mathbb{N}, \tag{35}$$

$H_{XXZ}$ 产生的时间演化实现了一个受控相位门

$$U(\tau) = G(\omega) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\omega} \end{pmatrix}, \tag{36}$$

在前两个量子比特的基底 $\{|\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle\}$ 中。

### 3.2.2 三量子比特哈密顿量与块结构

计入与第三个量子比特的受驱相互作用后，完整哈密顿量写为

$$H = H_{XXZ} + H_3^{\text{drive}}, \tag{37}$$

i.e.

$$\begin{aligned} H = \frac{J}{2}\left[\sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y + \left(1 - \frac{\omega A}{2\pi J}\right)\sigma_1^z\sigma_2^z\right] + \frac{\omega A}{4\pi}\left(\sigma_1^z + \sigma_2^z\right) \\ + \beta\,\sigma_2^z\sigma_3^z + \alpha\,\sigma_3^z + \frac{\varphi A}{\pi}\cos\left(\frac{2(\beta-\alpha)t}{\hbar} - \phi\right)\sigma_3^x. \end{aligned} \tag{38}$$

用 $\tau$ 表示时，驱动仍为 $\Omega(\tau)$，我们可以写成

$$H(t) = H_{3\mathrm{Q}}^{(0)} + \Omega(\tau)\left(\mathbb{1}\otimes\mathbb{1}\otimes\sigma_x\right). \tag{39}$$

在三量子比特计算基中

$$\Big\{|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle,$$

$$|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\Big\}, \tag{40}$$

静态部分 $H_3^{(0)}{}_{\mathrm{Q}}$ 是一个 $8\times8$ 矩阵。使用适当的幺正变换分离全局相位后（与式（13）略有相似），哈密顿量呈现出由三个对角块组成的块结构：一个与子空间 $2\times2$ 相关联的$\{|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\}$块，一个与 $2\times2$ 相关联的 $\{|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle\}$块，以及一个 $4\times4$ 块 $H_2$（$t$）与子空间相关联

$$\mathcal{H}_2 = \mathrm{span}\Big\{|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\Big\}. \tag{41}$$

前两个块（相差相位）等同于双量子比特分析中的上、下 $2\times2$ 块，对目标三量子比特门没有非平凡的贡献。关键动力学编码在 $H_2(t)$ 中，下面我们对此进行分析。

### 3.2.3 四维块与有效动力学

在子空间 $\mathcal{H}_2$ 内，哈密顿量块可写为

$$H_2(t) = \begin{pmatrix} \alpha-\beta-J & \Omega(\tau) & J & 0 \\ \Omega(\tau) & -\alpha+\beta-J & 0 & J \\ J & 0 & \alpha+\beta-J & \Omega(\tau) \\ 0 & J & \Omega(\tau) & -\alpha-\beta-J \end{pmatrix}. \tag{42}$$

若暂时忽略驱动，静态部分 $H_{2\ \mathrm{input}}$ 为

$$H_{2\ \mathrm{input}} = \begin{pmatrix} \alpha-\beta-J & 0 & J & 0 \\ 0 & -\alpha+\beta-J & 0 & J \\ J & 0 & \alpha+\beta-J & 0 \\ 0 & J & 0 & -\alpha-\beta-J \end{pmatrix}. \tag{43}$$

对 $H_{2\ \mathrm{input}}$ 对角化可得特征值

$$E_{\pm}^{(\pm)} = \pm\left(\alpha \pm \sqrt{J^2+\beta^2}\right). \tag{44}$$

相应的特征向量构成一组基，在该基下静态部分为对角形式。在此基下，横向驱动会耦合能量差由 $\sqrt{J^2+\beta^2}$ 控制的本征态对。

按照双量子比特情形中的做法，我们变换到由 $H_{2\ \mathrm{input}}$ 的特征基定义的相互作用绘景，并应用旋波近似，仅保留

近共振耦合。这将得到一个有效对角演化算符

$$\hat{U}_2(t)=\begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\alpha+\sqrt{J^2+\beta^2}\right)t} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\alpha-\sqrt{J^2+\beta^2}\right)t} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{i}{\hbar}\left(\alpha-\sqrt{J^2+\beta^2}\right)t} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\frac{i}{\hbar}\left(\alpha+\sqrt{J^2+\beta^2}\right)t} \end{pmatrix} e^{-iJt/\hbar}, \quad (45)$$

作用于 $\mathcal{H}_2$。在门时间 $t = t_{\mathrm{g}} = \pi\hbar/A$，我们施加条件，使对应于 $\pm\sqrt{J^2+\beta^2}$ 的相位模 $2\pi$ 后相等：

$$e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{J^2+\beta^2}t_{\mathrm{g}}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{J^2+\beta^2}t_{\mathrm{g}}},$$
$$e^{2\frac{i}{\hbar}\sqrt{J^2+\beta^2}t_{\mathrm{g}}} = 1, \quad (46)$$

这意味着

$$2\frac{1}{\hbar}\sqrt{J^2+\beta^2}t_{\mathrm{g}} = 2\pi l, \qquad l \in \mathbb{Z}, \quad (47)$$

因此

$$\sqrt{J^2+\beta^2} = lA \quad \Longrightarrow \quad \left(\frac{J}{A}\right)^2 + k^2 = l^2, \quad (48)$$

其中我们使用了 $\beta = kA$ 。因此，无量纲耦合满足一个简单的关系。等价地，

$$J = \pm\sqrt{l^2-k^2}\,A, \quad (49)$$

其中整数 $l > |k|$。方程（49）是对 $J$ 的附加约束，可确保在门时间下，块 $\mathcal{H}_2$ 具有所需的相位结构。

### 3.2.4 三量子比特Barenco门和Toffoli门

将 $\mathcal{H}_2$ 中的块演化与其余子空间中的平凡演化相结合，并像双量子比特情形那样考虑第三个自旋的驱动动力学，在 $t = t_{\mathrm{g}}$ 时的完整三量子比特时间演化算符可写为

$$U(t_{\mathrm{g}}) = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0 & 0 & 0 \\ 0&1&0&0&0&0 & 0 & 0 \\ 0&0&1&0&0&0 & 0 & 0 \\ 0&0&0&1&0&0 & 0 & 0 \\ 0&0&0&0&1&0 & 0 & 0 \\ 0&0&0&0&0&1 & 0 & 0 \\ 0&0&0&0&0&0 & e^{i\omega}\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) & -ie^{i(\omega+\phi)}\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \\ 0&0&0&0&0&0 & -ie^{i(\omega-\phi)}\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) & e^{i\omega}\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (50)$$

忽略整体全局相位后。这正是三量子比特 Barenco 门 $V_3(\varphi,\ \omega,\ \phi)$，其中前两个量子比特作为控制量子比特，第三个作为目标端。

特别地，取

$$\omega = \frac{\pi}{2}, \qquad \varphi = \pi, \qquad \phi = 0, \quad (51)$$

我们得到三量子比特 Toffoli 门。方程 .(49）表明，对于任意整数 $l > |k|$ ，均可选择 $J = \pm\sqrt{l^2-k^2}\,A$ 满足共振条件，从而得到一族离散的参数集，实现同一个逻辑门。

## 3.3 保真度和数值结果

为了评估该协议的性能和鲁棒性，我们计算理想 Barenco 门 $V_N(\varphi,\omega,\phi)$ 与由各情形下完整哈密顿量生成的精确时间演化算符 $U(t)$ 之间的算符保真度（8）（两个量子比特：式（9）；三个量子比特：式（38））。我们对参数值 $0 \le \varphi \le \pi$、$0 \le \omega < 2\pi$、$0 \le \phi < 2\pi$ 的一系列取值进行采样，每个区间按 10% 的步长递增，共得到 $11 \times 10 \times 10 = 1100$ 个参数三元组。对于每个三元组，我们演化 $U(t)$ 并计算 $F(t)$，然后对所有三元组取平均，得到 $\langle F(t)\rangle$。

图 1 展示了 $\langle F(t)\rangle$ 两种实现随时间的变化（时间单位为 $\pi\hbar/A$，因此 $t = \pi\hbar/A$ 对应于门时间 $t_g$）。所有数据均设定 $\alpha = 2A$。对于三量子比特情形，我们还施加

$$\frac{J}{A} = \sqrt{l^2 - k^2}, \tag{52}$$

其中 $l = 17$ 且 $k = 8$，这与共振条件（49）一致。两量子比特哈密顿量不涉及 $J$。

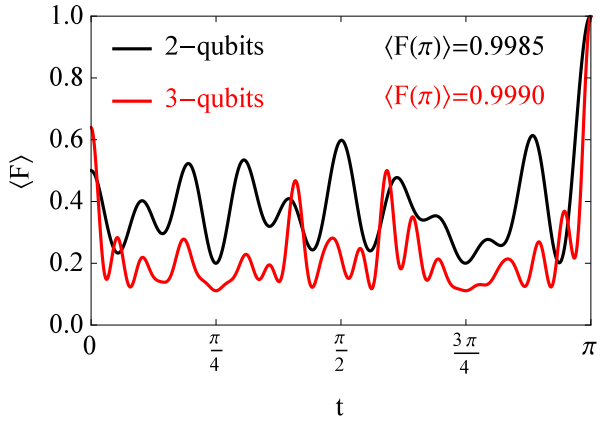


**图 1** Barenco 算符 $V_2(\varphi,\ \omega,\ \phi)$ 和 $V_3(\varphi,\ \omega,\ \phi)$ 的两量子比特和三量子比特自旋链实现的平均保真度 $\langle F(t)\rangle$ 随时间的变化。通过以各范围 10% 为步长改变 $0 \le \varphi \le \pi$、$0 \le \omega < 2\pi$ 和 $0 \le \phi < 2\pi$，我们对 1100 次实现取平均。参数：~~两种~~情形均为 $\alpha = 2A$；三量子比特情形为 $J = \sqrt{l^2 - k^2}\,A$，其中 $l = 17$ 且 $k = 8$。曲线达到 $\langle F(\pi)\rangle > 0.998$，体现了该协议的效率和鲁棒性。

尽管图 1 展示了对参数集的平均结果，但对 $(\varphi,\ \omega,\ \phi)$ 的各个取值分别进行的模拟，显示出基本相同的时间行为，这表明在所考察的范围内，保真度曲线在很大程度上不受这些参数具体取值的影响。这凸显了该协议的可调性和鲁棒性。

### 3.3.1 无序分析

三量子比特 Barenco 门的解析构造依赖于整数三元组 $(m,\ k,\ l)$，它们用于设定参数 $\alpha = mA$、$\beta = kA$ 和 $J = \sqrt{l^2 - k^2}\,A$。为考察其对制造和控制缺陷的鲁棒性，我们引入小幅偏差

$$\alpha(m + \delta m) = (m + \delta m)A,$$

$$\beta(k+\delta k) = (k+\delta k)A,$$
$$J(l+\delta l, k+\delta k) = \sqrt{(l+\delta l)^2 - (k+\delta k)^2}\, A, \tag{53}$$

其中 $\delta m$、 $\delta k$ 和 $\delta l$ 是无量纲扰动。图2总结了基准值（$m$、$k$、$l$） $=(2, 8, 17)$ 的四种情形：(a)–(c) 面板每次改变一个参数；(d) 面板则通过 $\delta m = \delta k = \delta l = \delta$ 同时改变所有参数。对于每个 $\delta \in [-0.10, 0.10]$ 值（步长为 0.01），我们在与上文相同的（$\varphi$、$\omega$、$\phi$）网格上对 1100 次实现取平均。

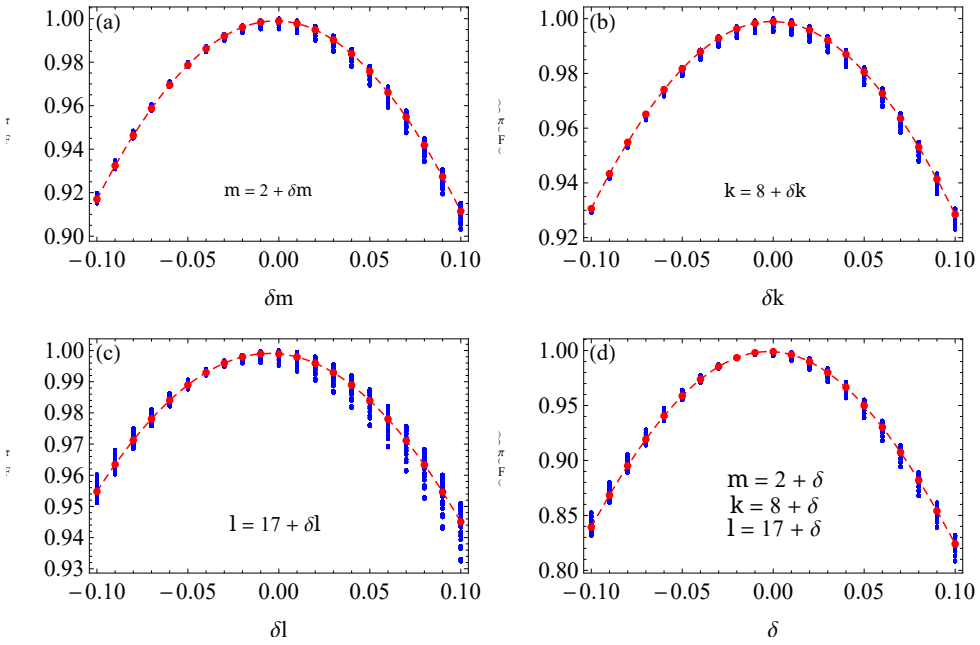


图 2 围绕 $(m, k, l)$ $=(2, 8, 17)$ 的变化量 $m \to m + \delta m$、 $k \to k + \delta k$ 和 $l \to l + \delta l$ 下的无序分析。对于每个 $\delta$ 值（从 $-0.10$ 到 0.10，步长为 0.01 ），我们按照图 1 的方法，对 $(\varphi, \omega, \phi)$ 进行平均，得到 1100 次实现（蓝点）。红点和虚线表示每个 $\delta$ 的平均值。各面板：（a）仅 $\delta m$；（b）仅 $\delta k$；（c）仅 $\delta l$；（d）联合变化 $\delta m = \delta k = \delta l = \delta$。即使存在无序，所有面板中 $|\delta| < 0.01$ 的平均保真度仍高于 0.99，表明其具有很强的鲁棒性。

总体而言，在所考察的整个参数范围内，小幅偏差不会显著降低性能。每次只改变一个单独的校准常数时，对于 $|\delta j| \le 0.03\,(j \in \{m, k, l\})$，保真度在数值精度范围内基本保持不变，只有偏差更大时才会降至 99% 以下。这一趋势与有效哈密顿量的结构一致：驱动诱导旋转取决于失谐 $2(\beta - \alpha)$ 以及由 $A$设定的门时间缩放，因此对 $\alpha$ 或 $\beta$ 的微小扰动主要会改变局域旋转速率的尺度，而不会从定性上改变实现 Barenco 操作的块结构。相比之下， $J$ 通过共振约束 $J/A = \sqrt{l^2 - k^2}$参与三量子比特构造；对 $(l,\ k)$ 的扰动会因此改变 $J$，使其

$$\frac{\delta J}{A} \approx \frac{l\,\delta l - k\,\delta k}{\sqrt{l^2 - k^2}},$$

因此，同时变化的参数 $(\delta l,\ \delta k)$ 若产生叠加效应（即 $l\,\delta l \approx k\,\delta k$），危害最大。这解释了为何三个参数同时变化时性能下降略为明显：有效失谐和旋转角会协同漂移，而非随机变化，使系统进一步偏离支撑解析协议的离散共振族。

从动力学角度看，参数偏移会扰动对角能量（改变累积的动力学相位）和横向拉比频率（改变旋转角），从而使希尔伯特空间中的轨迹产生不对称畸变。这种不对称性解释了在较大的 $|\delta|$ 下观测到的正向与负向偏差之间的轻微差异，尤其是在门时间 $t_{\mathrm{g}} = \pi\hbar/A$ 附近，此时角度或相位的微小误差会对 $F(t)$ 产生最大的影响。尽管如此，在现实的校准预算下，该方案仍稳居高保真度区间：即使在 $|\delta| = 0.01$ 同时变化的情况下，我们发现平均保真度仍高于 99%；而对于幅度高达 $|\delta j| = 0.03$ 的单参数漂移，保真度曲线与理想情况几乎无法区分。在实际应用中，这种鲁棒性意味着可以容忍适度的静态非均匀性或缓慢的控制漂移，而无需主动进行误差缓解；剩余的敏感性主要由 $2(\beta - \alpha)$ 的相干失谐以及偏离 $J/A = \sqrt{l^2 - k^2}$ 共振所致，可通过微调 $(m,\ k,\ l)$ 或对门时间进行小幅确定性调整来补偿。

# 4 结论

我们提出了一种完全解析的协议，利用短驱动自旋链实现 Barenco 型多量子比特受控门。对于两个量子比特，从 Ising 相互作用和作用于第二个量子比特的共振横向驱动出发，我们展示了如何通过一系列幺正变换和旋波近似，得到一个可在明确门时间实现双量子比特 Barenco 门 $V_2(\varphi,\ \omega,\ \phi)$ 的有效哈密顿量。这也包括作为特例的标准 CNOT 门。

随后，我们将这一构造扩展到一个三量子比特 $XXZ$ 链中，其中前两个量子比特通过 $XXZ$ 相互作用耦合，而第二个和第三个量子比特则通过相同的驱动 Ising 方案相连。通过利用三量子比特哈密顿量的块结构，并根据方程（ $J$ 49）仔细调节交换耦合，我们在一个四维子空间中获得了有效演化，从而实现三量子比特 Barenco 门$V_3(\varphi,\ \omega,\ \phi)$，其中包括作为特例的托佛利门。

所有推导均对该协议作了完整且自洽的阐述。基于完整哈密顿量进行的数值模拟证实，在较宽的参数范围内均可实现高保真度，表明该方案对（$\varphi$、$\omega$、$\phi$）及静态耦合的适度变化具有鲁棒性。

我们的结果展示了如何以物理形式简单的自旋链哈密顿量和局域驱动，清晰且便于解析地实现非平凡的多量子比特门。可能的扩展方向包括分析退相干效应、进行脉冲形状优化，以及推广至更长链，以实现高阶多控制操作和更复杂的量子线路。

# 参考文献

[1] Bennett, C.H., DiVincenzo, D.P.：《自然》**404**，247（2000）。

[2] Nielsen, M.A., Chuang, I.L.：《量子计算与量子信息》。剑桥大学出版社，剑桥（2000）。[3] Barenco, A.：《伦敦皇家学会会刊 A》449，679（1995）。[4] Barenco, A., Bennett, C.H., Cleve, R., DiVincenzo, D.P., Margolus, N., Shor, P., Sleator, T., Smolin, J.A., Weinfurter, H.：《物理评论 A》52，3457（1995）。[5] Toffoli, T.：可逆计算。载于：de Bakker, J.W., van Leeuwen, J.（编）《自动机、语言与编程》。施普林格，柏林（1980）。[6] Rasmussen, S.E., Groenland, K., Gerritsma, R., Schoutens, K., Zinner, N.T.：《物理评论 A》101，022308（2020）。[7] Lee, C.F., Johnson, N.F.：《物理评论 A》70，052322（2004）。[8] Shi, X.：《物理评论 A》97，032310（2018）。[9] Bose, S.：《物理评论快报》91，207901（2003）。[10] Burgarth, D., Bose, S.：《物理评论 A》71，052315（2005）。[11] Kay, A.：《物理评论 A》73，032306（2006）。[12] Seifnashri, S., Kianvash, F., Nobakht, J., Karimipour, V.：《物理评论 A》93，062342（2016）。[13] Marchukov, O., Volosniev, A., Valiente, M., Petrosyan, D., Zinner, N.T.：《自然·通讯》7，13070（2016）。[14] Vieira, R., Rigolin, G.：《物理快报 A》382，2586（2018）。[15] Vieira, R., Rigolin, G.：《量子信息处理》18，135（2019）。[16] Vieira, R., Rigolin, G.：《物理快报 A》384，126536（2020）。[17] Katz, O., Cetina, M., Monroe, C.：《PRX 量子》4，030311（2023）。[18] Cirac, J.I., Zoller, P.：《物理评论快报》74，4091（1995）。[19] Müller, M., Liang, L., Lesanovsky, I., Zoller, P.：《新物理学杂志》10，093009（2008）。[20] Ballance, C., Harty, T., Linke, N., Sepiol, M., Lucas, D.：《物理评论快报》117，060504（2016）。[21] Webb, A.E., Webster, S.C., Collingbourne, S., Bretaud, D., Lawrence, A.M., Weidt, S., Mintert, F., Hensinger, W.K.：《物理评论快报》121，180501（2018）。[22] Houck, A., Türeci, H., Koch, J.：《自然·物理学》8，292299（2012）。

[23] Zhukov, A.A., Shapiro, D.S., Remizov, S.V., Pogosov, W.V., Lozovik, Yu.E.: 《物理快报 A》**381**, 592596 (2017)。

[24] Loss, D., DiVincenzo, D.P.: 《物理评论 A》**57**, 120 (1998)。

[25] Baart, T. 等: 《自然·纳米技术》**12**, 2630 (2017)。

[26] Lewenstein, M. 等: 《物理进展》**56**, 243379 (2007)。

[27] Heule, R., Bruder, C., Burgarth, D., Stojanovi, V.M.: 《物理评论 A》**82**, 052333 (2010)。

[28] Michoel, T., Mulherkar, J., Nachtergaele, B.: 《新物理学杂志》**12**, 025003 (2010)。

[29] Wu, Y., Yang, X.: 《物理评论快报》 **98**, 013601 (2007).

[30] Pedersen, L. H., Møller, N. M., Mølmer, K.: 《物理快报 A》 **367**, 47 (2007).

[31] Cabrera, R., Shir, O.M., Wu, R., Rabitz, H.: 《物理学杂志 A：数学与理论》 **44**, 095302 (2010).

[32] Kristensen L.B., Degroote M., Wittek P. 等: 《npj 量子信息》 **7**, 59 (2021年).

# 声明

## 资金

本工作得到巴西国家科学技术发展委员会（CNPq）通过资助编号409673/2022-6的支持。R. Vieira获得了圣卡塔琳娜州研究与创新支持基金会（FAPESC）第25/2025号项目公告的研究支持。

## 利益冲突

作者没有需要披露的相关财务利益或非财务利益。

## 作者贡献

E.P.M.A.与R.V.对本工作做出了同等贡献，并审阅了稿件。