量子化学的自旋适配态制备

Matthew L. Sims-Goh [1,2]、Fredrik Hasselgren [3,4] 和 Hamza Jnane

[1]Quantum Motion，澳大利亚 Eveleigh，Cornwallis 街 4 号，NSW 2015[2]物理学院，墨尔本大学，澳大利亚帕克维尔，VIC 3010[3]Quantum Motion，英国伦敦 Sterling Way 9 号，N7 9HJ[4]数学研究所，牛津大学，英国牛津 Woodstock Road，OX2 6GG

arXiv:2611.30014v1 [quant-ph] 23 Nov 2026

强关联分子的量子相位估计需要一个与真实基态具有高重叠的初始态，而制备这样的初始态需要付出巨大的容错成本。密度矩阵重整化群（DMRG）生成的矩阵乘积态（MPS）是首选方案之一，但现有量子线路要么将其张量视为稠密张量，要么未充分利用分子电子哈密顿量中存在的全部对称性。在量子化学中，DMRG 还利用总自旋这一非阿贝尔对称性：它为每个自旋多重态存储一个振幅，而不是为每个态存储一个振幅。我们证明，这种自旋适配 MPS 的约化张量以幺正群方法的步为标记，构成一种阿贝尔对称矩阵乘积态；现有的块稀疏制备协议可以加载这种态，其成本由多重态数量决定。随后，在每个格点施加一次由克莱布什–戈尔丹系数确定的态无关旋转，即可将该量子态变换回占据数基。我们针对铁硫簇活性空间模型的单重态基态给出了量子线路的资源估算：与稠密方法相比，托佛利门数量最多可改善至 135×；与应用于相同量子态的块稀疏方法相比，最多可改善至 4.9×；同时所需辅助量子比特最多减少 3.7×。

1 引言

随着实用规模量子计算机日益成为现实，寻找具有真正经济和科学价值的量子应用变得愈发迫切。在这些应用中，研究化学和材料系统的基态似乎最有希望——众所周知，量子相位估计（QPE）程序原则上能够实现指数级加速 [1–3]，，人们普遍期待在计算机模拟中 利用量子处理器开展研究能够推动药物发现 [4–6]，，开辟高效的固氮途径 [7–10]，，并加快下一代电池的设计 [11–13]。然而，这类计算取决于能否 sup-为其提供一个足够好的初始态 [14–19]——事实上，量子相位估计的成功概率随初始态与真实基态的重叠度平方变化 [2]。尽管这是量子相位估计的关键瓶颈，资源分析往往假设可以获得这样一种重叠度完美的量子态，而其成本远低于相位估计本身 [9, 18–20]。能否找到具有足够重叠度的量子态，可能决定量子化学能否实现指数级优势 [15]。近期相位估计成本降低后，制备这样的量子态所需的成本可能与相位估计本身相当 [20, 21]。

通用量子态的制备成本呈指数增长 [22–24]，，因此高效的量子态制备必须依赖某种隐藏的底层结构，通常与某种经典可模拟性的概念有关 [16–20, 25–46]。必须在两者之间维持微妙的平衡：其中最简单的方案在量子相位估计（QPE）中的成功概率会呈指数衰减，因而不适用 [15, 18]，；但加载过于复杂的初始态又可能超过量子计算本身的成本 [47, 48]。张量网络是量子态制备中极其有用的选择 [18–20, 25–34]，，部分原因在于其键维数 χ提供了一个可调节的“旋钮”，通过调整它即可实现这种平衡。矩阵乘积态（MPS）是最简单且最广泛使用的张量网络拟设，并已在量子 [49–62] 和经典 [63–65] 系统的经典模拟中取得巨大成功；因此，它们也是量子态制备中制备基态 [18–20, 31–33] 和经典数据 [26–31]的主要方案。

量子系统的基态可以通过密度矩阵重整化群（DMRG） [54–61], 近似得到；该方法在量子化学领域取得了巨大成功 [60, 61, 66–73]。这种成功在很大程度上依赖于对称性。分子电子哈密顿量守恒电子数、自旋投影和总自旋，通常还具有点群对称性；充分利用这些对称性可以极大降低计算成本 [58–62]。利用总自旋的DMRG程序库称为“自旋适配”的程序库；没有它们，最先进的量子化学计算将无法实现。基于矩阵乘积态的态制备则，

Matthew L.Sims-Goh：matt.sims-goh@quantummotion.tech

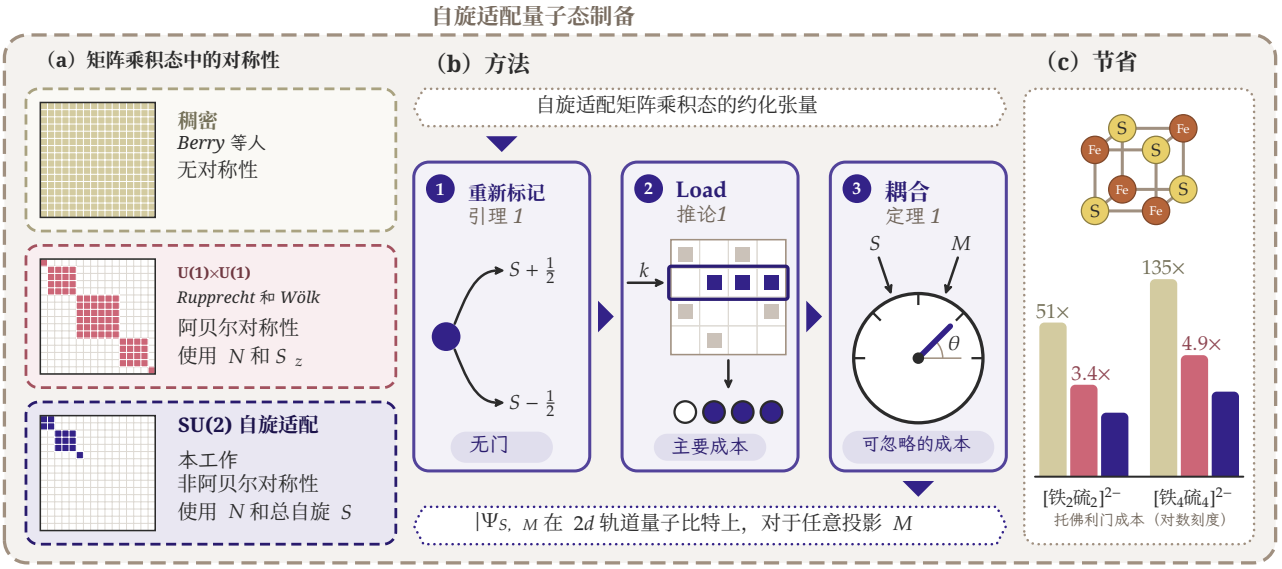


图1： **本工作的概述。(a)** 同一矩阵乘积态在三种描述下的单个位点矩阵，已填充的条目表示存储的元素。无对称性时，矩阵是稠密的 [18, 19] （金色）；粒子数的阿贝尔对称性 N 和自旋投影 S_z 使其成为块稀疏矩阵 [20] （红色）；总自旋 S这一非阿贝尔对称性，则以每个多重态对应一个条目，取代了每个态对应一个条目（蓝色，即我们的方法）。 **(b)** 本方法的三个步骤：对约化张量进行经典重标记（引理 1），从而可以采用参考文献中的分块稀疏加载 [20] （推论 1），并在每个格点进行一次旋转，其角度由沿键传递的自旋 S 及其投影 M 决定（定理 1）。**(c)** 采用三种矩阵乘积态描述制备两个铁硫簇的单重态基态时，托佛利门成本的节省情况；同时给出稠密方法和 U(1) ×U(1) 方法的制备成本超出我们方法的倍数（表 2）。

在这些优化方面大幅落后：绝大多数例程都会以矩阵乘积态的完整形式加载MPS，而不考虑对称性约束；即使在对称性能将有意义的信息压缩几个数量级的情况下也是如此 [18, 19, 31, 32, 34]。虽然可以在加载后以投影方式施加对称性 [74],但这并不会降低加载量子态本身的成本。制备量子态的成本最终应当只反映经典计算为其存储的参数数量；但据我们所知，几个月前 Rupprecht 和 Wölk 才首次将对称性用于矩阵乘积态制备 [20],他们利用阿贝尔对称性诱导的块稀疏性，相应地降低了加载成本。这使人们能够避免承担与阿贝尔对称性下冗余信息相关的成本，例如粒子数和自旋投影；但由于非阿贝尔对称性具有更复杂的表示论和融合规则，这种方法与非阿贝尔对称性不兼容，因此必须扩充底层量子态的表示，将其映射到量子电路。在本工作中，我们通过利用量子化学哈密顿量的全部对称性，进一步推进了这一进程，具体而言是利用其SU(2)诱导的非阿贝尔对称性，从而能够以反映自旋适配矩阵乘积态实际经典规模的成本来制备它们。我们的主要结果可以非正式地表述如下：

定理 1 （非正式表述）。 设一个自旋适配矩阵乘积态定义在d 个轨道上，并表示总自旋为 $|\Psi_{SM}\rangle$ 且投影为 S的态 $M = -S, \ldots, S$。一个量子电路可制备 $|\Psi_{SM}\rangle$，对任意 M均适用，并由一个 $\mathcal{O}(\log d)$ 量子比特寄存器的初始值选定。其 *Toffoli* 成本继承自文献 *[20]* 中块稀疏制备的成本，但块按多重态而非态计数（即每个自旋为 $2S'+1$ 的多重态所需振幅减少 S'倍），此外每个格点还会产生相对较小的开销，且该开销与张量的各项无关。

我们在图1中概述了我们的工作；图1（a）展示了：对于量子化学问题，表示一个矩阵乘积态所需的信息量会随着所利用对称性层级的不同而发生巨大变化。将块稀疏制备扩展到自旋适配矩阵乘积态的障碍在于，总自旋不像粒子数那样具有可加性：单占据轨道既可以提高也可以降低与其耦合的轨道的自旋，因此格点的量子态不再决定其键上的对称性标签如何变化。我们的构造（图1（b））通过为每个格点标记上述两种情况中的哪一种发生，消除了这一障碍。该标记就是幺正群方法中的 步，量子化学家长期以来一直在这种方法中书写自旋适配基态 [75–77], 。就这些步而言，自旋适配矩阵乘积态所存储的张量，即其约化张量，构成一个阿贝尔对称矩阵乘积态，而参考文献 [20]中的块稀疏制备无需修改即可加载该态。随后，在每个格点施加一次态无关旋转，便可将该量子态恢复到占据数基；这些旋转合在一起构成参考文献 [46]中量子 Paldus 变换的逆变换。

我们在铁硫簇 $[Fe_2S_2]^{2-}$ 和 $[Fe_4S_4]^{2-}$的单重态基态（总自旋 $S=0$）的 DMRG近似上，展示了我们电路构造在实际应用中的节省效果；与参考文献 [20]相比，Toffoli 门最多可减少 $4.9\times$ ，与参考文献 [19] 中的协议相比，最多可减少 $135\times$ 个 Toffoli 门。即使将这些量子态截断至相同保真度，这一节省仍然存在；并且，随着大自旋多重态沿键传递的施密特权重占比增加，节省幅度也会增大。

本文结构安排如下。第2节以教学方式回顾必要的背景知识，逐步介绍具有阿贝尔对称性和 SU(2)对称性的矩阵乘积态、自旋适配矩阵乘积态和酉群方法，并确定费米子以及自旋耦合的约定，量子电路的构造依赖于这些约定。第 3 节介绍量子电路的构造、其成本，以及我们的主要理论结果和证明。第 4节展示并分析量子化学中具体问题实例的资源估算，第 5节总结全文。

2 预备知识

2.1 设定

在全文中，我们考虑由 d 个空间轨道构成的系统，轨道按 $i=1,\ldots,d$ 排列，每个轨道包含自旋轨道 $(i,\uparrow)$ 和 $(i,\downarrow)$，因此福克空间由 $2d$ 个费米子模式构成。我们考虑通过 Jordan-Wigner 映射，按照交错顺序 $(1,\uparrow),(1,\downarrow),(2,\uparrow),(2,\downarrow)$ 将其映射到量子计算机的量子寄存器。我们关注具有 U(1) $\times$ SU(2) 对称性（即与数算符 $\hat{N}$ 和总自旋算符 $\hat{S}^2$对易）的哈密顿量，最常见的是量子化学中的无自旋电子哈密顿量

$$H=\sum_{ij,\mu}h_{ij}a^\dagger_{i\mu}a_{j\mu}+\frac{1}{2}\sum_{ijkl,\mu\nu}v_{ij,kl}a^\dagger_{i\mu}a^\dagger_{j\nu}a_{l\nu}a_{k\mu},\quad(1)$$

其中，$\mu,\nu\in\{\uparrow,\downarrow\}$ 表示费米子自旋轨道的自旋，h_{ij} 为单电子积分，$v_{ij,kl}$ 为双电子积分（不含任何破坏对称性的 μ 或 ν 依赖），并采用物理学家的指标约定 $v_{ij,kl}=\langle ij|\,r_{12}^{-1}\,|kl\rangle=(ik|jl)$。由于这些哈密顿量与 $\hat{N}$、$\hat{S}^2$和 $\hat{S}_z$对易，其本征态可用量子数 (N,S,M) 标记，即包含 N个电子、总自旋为 S且自旋投影为 M。正如我们在第 3.2 节中所述，我们的框架也可以利用阿贝尔点群对称性。

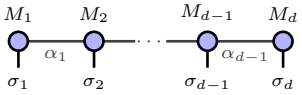
我们考虑如何将这类哈密顿量的基态高效加载到量子计算机的寄存器中。遵循先前的研究 [18–20]，我们采用矩阵乘积态表示，用一个由 d 张量 $\{M_i\}$网络对量子态进行参数化。

定义1（矩阵乘积态（MPS））。设每个格点 $i\in\{1,\ldots,d\}$ 都带有一个维数为 D 的局域基 $\{|\sigma_i\rangle\}$。矩阵乘积态是如下形式的量子态

$$|\Psi\rangle=\sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_d}M_1^{\sigma_1}M_2^{\sigma_2}\cdots M_d^{\sigma_d}\,|\sigma_1,\ldots,\sigma_d\rangle\,,\quad(2)$$

其中，$M_i^{\sigma_i}$是通过将格点-i 张量 M_i 的物理指标固定为值$\sigma_i\in\{1,\ldots,D\}$得到的 $\chi_{i-1}\times\chi_i$ 矩阵，其中 $\chi_0=\chi_d=1$。整数 χ_i为键维度，其最大值 $\chi=\max_i\chi_i$ 通常称为矩阵乘积态的键维数。

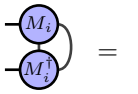
通常，使用彭罗斯图示法表示张量网络很方便 [78, 79], ，其中方程 2的振幅可以写作

$\langle\sigma_1,\ldots,\sigma_d|\Psi\rangle=$ 

，(3)

其中 $\alpha_i=1$，……，χ_i是连接张量的键指标 M_i ，并且 M_{i+1}。张量网络的规范自由度 [57, 79] 意味着我们可以自由地将张量网络置于右正则形式：

定义 2（右正则形式）。若每个张量 M_i都满足等距条件，则称矩阵乘积态处于右正则形式



$=$) ，(4)

即 $\sum_{\sigma_i}M_i^{\sigma_i}\,(M_i^{\sigma_i})^\dagger=\mathbb{1}_{\chi_{i-1}}$。这遵循张量网络文献中的标准约定 *[57, 79]*；在先前关于态制备的研究中，参考文献 *[20]*采用了相同的约定，而参考文献 *[18, 19]*则将这种形式称为左规范。为避免疑义，按照此约定，正交中心位于左侧，等距映射从左向右延展，态制备则以从左向右扫描的方式进行。

2.2 具有阿贝尔对称性的张量网络

为了充分利用化学哈密顿量的全部对称性，我们首先考虑具有阿贝尔对称性的张量网络，例如粒子数守恒。Ref. [20] 利用这类对称性降低了态制备成本。在矩阵乘积态（MPS）中，阿贝尔对称性体现为块稀疏性：由于对称性约束，张量中的大块区域必定为零。具体而言，对称性意味着存在一条守恒定律，并且为物理腿和键腿的每个索引值分配一个加性荷，以追踪这一守恒量的流动（例如，单个守恒量（如 N）对应一个整数，或者用一个整数向量表示多个守恒量

）。在化学中，守恒量通常是电子数和总自旋投影。形式上：

定义 3（阿贝尔对称矩阵乘积态）。令$\hat{}\ Q \equiv\sum_{i=1}^{d}\ \hat{}\ Q_i$ 为一个守恒荷，它是单格点项$\hat{}\ Q_i$ 之和（例如$\hat{}N$ 或$\hat{}\ S_z$）。将其在键 i 右侧格点上的部分和写作$\hat{}\ Q^{>i} = \sum_{k>i}\hat{}Q_k$，并选择每个局域基 $\{|\sigma_i\rangle\}$为$\hat{}\ Q_i$ 的本征基，其本征值为 $q\ (\sigma_i)$。如果每个键指标 α_i 都携带一个荷 $q\ (\alpha_i)$，右边界键携带 $q\ (\alpha_d)\ = 0$，并且每个格点张量 M_i 都遵守选择定则，则一个矩阵乘积态具有相应的阿贝尔对称性

$$(M_i^{\sigma_i})_{\alpha_{i-1}\alpha_i} = 0 \quad whenever \quad q(\alpha_{i-1}) \neq q(\sigma_i)+q(\alpha_i). \tag{5}$$

也就是说，键 i 上的荷计数其右侧所有部分的荷；沿链向左移动时，每个格点都会加上自身的荷，最终在左边界键上求和得到总荷 Q。

这种荷的累积可以从量子态如何从张量逐个轨道构建而来观察到，构建方向是从右向左。我们用 $|\alpha_i\rangle$ 表示轨道 $i+1,\ldots,d$的量子态，它由收缩键 i 右侧的张量得到，同时将键 i 的指标固定为 α_i。键 d 右侧的块为空，其量子态为福克真空，而轨道 i 则附接到其右侧的块上，成为

$$|\alpha_{i-1}\rangle = \sum_{\sigma_i,\alpha_i} (M_i^{\sigma_i})_{\alpha_{i-1}\alpha_i} |\sigma_i\rangle \otimes |\alpha_i\rangle\,, \tag{6}$$

其中 $|\alpha_0\rangle\ = |\Psi\rangle$，这是按构造得出的，因为所有张量都已收缩。

我们定义真空态的荷为零，即$q(\alpha_d)\ = 0$。如果每个右块态 $|\alpha_i$都具有确定荷 $q(\alpha_i)$，即是算符$\hat{}\ Q^{>i}$ 的本征值为该值的本征态，那么总和（6）中的每个非零项的荷都是 $q(\sigma_i)+q(\alpha_i)\ = q(\alpha_{i-1})$，因为选择定则（5）会令所有其他项为零。因此，每个 $|\alpha_{i-1}$都具有确定荷 $q($ $\alpha_{i-1})$，并依此沿链向左，直到 $|\Psi$，其荷为 $Q = q(\alpha_0)$。

根据这一推理，可以证明，一个量子态 $|\Psi\rangle$是$\hat{}\ Q$ 的本征态，且本征值为 Q，当且仅当它可以写成一个阿贝尔对称矩阵乘积态，其左边界键携带荷$q(\alpha_0)$ $= Q$ [57, 58]。因此，如果哈密顿量具有对称性 $[H, \hat{}$ $Q] = 0$，那么其基态$\hat{}$可以选择为 Q 的本征态，因而具有带适当左边界荷的阿贝尔对称矩阵乘积态表示，可作为 DMRG 的合适对称性约束试探态。随后按荷扇区对键指标排序，即可使每个张量 $M_i^{\sigma_i}$都呈块稀疏结构，从而能够高效地存储和操作矩阵乘积态，因为只需存储并收缩非零块；其成本由块大小而非键维数（即这些块大小之和）决定。如参考文献 [20],所示，这一点也可用于降低态制备成本。

我们选择了较少见的从右向左电荷累积约定 [58]。对于阿贝尔对称 MPS，这只是简单的重新标记，因为键 i 处的左块携带荷 $Q - q(\alpha_i)$；但对于总自旋而言，其融合并非加法，这是一项真正会改变张量结构本身的选择。如第3.3节所述，态制备电路要求等距规范与电荷融合的方向相反。我们将在第2.4.2节重新探讨自旋适配 MPS 的这一构造。

2.3 具有 $SU(2)$ 对称性的张量网络

为利用化学哈密顿量的对称性，我们首先回顾自旋适配态的结构，从自旋加法和SU(2)的表示理论谈起。哈密顿量(1) 与$\hat{}S^2$对易，但$\hat{}S^2$ 并非定义3所要求形式的荷，因为它无法写成单点项之和：

$$\hat{S}^2 = \sum_i \hat{\boldsymbol{s}}_i^2 + \sum_{i\neq j} \hat{\boldsymbol{s}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{s}}_j. \tag{7}$$

虽然 SU(2) 不变性确实意味着较弱的$\hat{}\ S_z$对称性（如参考文献 [20] 中用于态制备的对称性），但$\hat{}\ \hat{}\ \hat{}S_x$，$S_y$ 和 S_z 彼此不对易，因此要充分利用对称性带来的压缩，还需要进一步的结构。自旋为 S 的多重态是由量子态 $|S, M,\ M = -S, \ldots, S$张成的 $(2S + 1)$ 维空间；在自旋旋转作用下，这些量子态会相互旋转。阿贝尔对称方法根据多重态中各量子态的 M 值，逐一计数。由于哈密顿量在自旋旋转下保持不变，因此每个多重态只需计数一次，这使每个自旋-S 扇区的键维数降低 $(2S + 1)$ 倍，并相应降低态制备成本。

2.3.1 自旋加法与 SU(2) 的表示

阿贝尔荷按照加法融合规则（5））组合，而自旋则按照角动量耦合规则 [80], 组合，这些规则必须在每个键处遵守。总自旋算符$\hat{}S_\alpha = \sum_{i=1}^{d}\hat{}s_{\alpha,i}$ 与$\hat{}N$对易，因此，包含 d 个轨道的系统的福克空间 $\mathcal{H}$可分解为 U(1) × SU(2) 的不可约表示（irreps），

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{N,S} \mathbb{C}^{n_{N,S}} \otimes V_S, \tag{8}$$

其中，V_S 是（$2S + 1$）维自旋-S 不可约表示，由 $|S$、$M\rangle$ 张成，其中 $M\ = -S$、.....、 S，而 $n_{N、}\ _S$是其重数，即它出现的次数

粒子数为 N。公式 8 的不可约表示分解还为$\mathcal{H}$提供了一个方便的基，即多重态基

$$|a, S, M\rangle = |a\rangle \otimes |S, M\rangle , \tag{9}$$

其中 $a = 1,\ldots, n_{N,S}$是一个重数标签，用于标记 $\mathbb{C}^{n_{N,S}}$ 并区分粒子数和自旋相同的多重态（同时承载 N）；而量子态 $|S, M\rangle$构成了 $\hat{}V_S$的标准基：它们是由升降算符相互关联、系数非负的 S_z 本征态

$$\hat{S}_\pm |S, M\rangle = \sqrt{(S \mp M)(S \pm M + 1)}\, |S, M \pm 1\rangle . \tag{10}$$

多重态基(9) 是构造自旋适配态的重要一步，因为自旋旋转仅作用于第二个因子 $|S, M\rangle$（在多重态内部混合 $2S + 1$各态，而不改变 a），因此可以分离出所有受对称性约束的分量，仅由重数分量 $|a\rangle$ 承载关于量子态的非平凡信息。重数标签 a 相当于阿贝尔情形下荷扇区内的索引； V_S 额外的结构体现了总自旋对称性的非阿贝尔特性（对于阿贝尔对称性，该因子将是平凡的）。

现在考虑定义在希尔伯特空间$\mathcal{H}_1$ 和$\mathcal{H}_2$上的两个可区分自旋系统的耦合：复合希尔伯特空间是张量积 $\hat{}\quad \hat{}\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2,$，而自旋算符 $\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_2$ 各自只作用于所属子系统，因此总自旋为$\hat{}\hat{}\quad \hat{}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2$。电子是不可区分的，我们将在第2.4.1 节说明，尽管如此，电子轨道的块仍可用这种方式处理。重数因子可以直接组合，而 V_S 不可约表示则依据克莱布什–戈尔丹级数进行组合

$$V_{S_1} \otimes V_{S_2} \cong \bigoplus_{S=|S_1-S_2|}^{S_1+S_2} V_S, \tag{11}$$

其中每个总自旋至多出现一次；自旋投影仍按照阿贝尔融合规则 M =$M_1 + M_2$相加，但总自旋则依据三角条件进行组合

$$S \in \{|S_1 - S_2|, |S_1 - S_2| + 1, \ldots, S_1 + S_2\}, \tag{12}$$

而耦合态是乘积态的线性组合

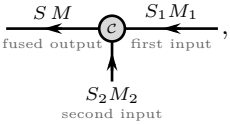
$$\begin{aligned} |a, b; S, M\rangle = \sum_{M_1} & \mathcal{C}^{SM}_{S_1 M_1;\, S_2 M-M_1} \\ & \times |a, S_1, M_1\rangle \otimes |b, S_2, M - M_1\rangle , \end{aligned} \tag{13}$$

其中， a和 b分别是自旋为 S_1 和 S_2 的两个子系统的重数标签；利用 $M_2 = M - M_1$ （见定义 4）消去了对M_2 的求和，而该求和以克莱布什–戈尔丹系数 $\mathcal{C}^{SM}_{S_1 M_1;\, S_2 M_2}$为权重，其定义如下。

定义 4 （克莱布施-戈丹系数）。对于自旋为 S_1, S_2 以及总自旋为 S 且属于 *Clebsch–Gordan*级数 (11)的情形，令 $|S, M\rangle$，$M = -S, \ldots, S$, 为 V_S (10)的一组标准基。克莱布施-戈丹系数是其在乘积基中的分量，

$$\mathcal{C}^{SM}_{S_1 M_1;\, S_2 M_2} \equiv (\langle S_1, M_1| \otimes \langle S_2, M_2|)\, |S, M\rangle , \tag{14}$$

除非 $M_1 + M_2 = M$，否则其值为零。式 *10*将该基确定下来：对于每个 S，还差一个相位；我们按照康登-肖特利约定 *[81]*,$\mathcal{C}^{SS}_{S_1 S_1}$进行选择；$S_2 S-S_1 > 0$。于是所有系数均为实数。次序十分重要：交换两个因子会使系数乘以$(-1)^{S_1+S_2-S}$；为记录这一点，我们用图形表示法将克莱布施-戈丹系数写为

$\mathcal{C}^{SM}_{S_1 M_1;\, S_2 M_2} =$ 

, (15)

其中，带箭头的线表示具有相应投影的自旋，箭头表示自旋融合的方向。

如上所述，我们选择了从右向左的自旋融合方向，即从右侧的真空态融合到左侧的总自旋，这与更常见的从左向右约定相反 [59, 61, 75, 82], ，原因将在第3.3节中显现。

2.3.2 通过 Wigner-Eckart 定理进行结构约化

方程13中的耦合仅作用于自旋投影——重数标签 a和 b 在方程两侧相同，而且克莱布什-戈丹系数不依赖于它们。因此，我们希望将真正的物理内涵与自旋对称性所施加的几何约束分离开来，而这正是 Wigner-Eckart 定理所实现的。由此，耦合中的每一对多重态都会恰好贡献一个具有每种可能总自旋的多重态 S ，且满足 $|S_1 - S_2| \le S \le S_1 + S_2$ Clebsch–Gordan级数的三角条件(11)。这构成复合系统的完备基，涵盖了所有$(2S_1 + 1)(2S_2 + 1)$个乘积态，并且是方程9 所示形式的多重态基，因为每个总自旋为 S 的多重态，都由耦合形成它的那一对多重态唯一确定：其中一个a 的自旋为S_1 ，另一个 b的自旋为 S_2。Wigner-Eckart 定理表明，任何具有确定总自旋的量子态，其系数都具有这种结构：

命题1 (Wigner-Eckart 定理，量子态形式)。*(i)* 设 $|\Psi_{SM}\rangle \in H$ 是复合系统的一个量子态，它是总自旋 $\hat{}\boldsymbol{S}^2$ 和自旋投影 $\hat{}\, S_z$ 的特征向量，对应本征值分别为 $S(S+1)$ 和 M，并以两个子系统的多重态基表示

as

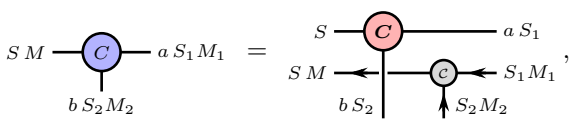
$$|\Psi_{SM}\rangle = \sum_{\substack{a,S_1,M_1\\ b,S_2,M_2}} C^{SM}_{(a,S_1,M_1),(b,S_2,M_2)} \times |a,S_1,M_1\rangle \otimes |b,S_2,M_2\rangle\,, \tag{16}$$

其中，求和遍历第一子系统的所有多重态 (a, S_1) 和第二子系统的所有多重态 (b, S_2) ，以及它们的投影 $M_i = -S_i, \ldots, S_i$。那么系数 $C^{SM}_{(a,S_1,M_1),(b,S_2,M_2)}$ 可分解为

$$C^{SM}_{(a,S_1,M_1),(b,S_2,M_2)} = \mathcal{C}^{SM}_{S_1M_1;\,S_2M_2}\boldsymbol{C}^{SM}_{(a,S_1),(b,S_2)}, \tag{17}$$

对于一个约化系数 $\boldsymbol{C}^{SM}_{(a,S_1),\,(b,\,S_2)}$，它既不依赖于 M_1，也不依赖于 M_2；克莱布什–戈尔丹系数 $\mathcal{C}^{SM}_{S_1M_1;\,S_2M_2}$ 在 S 违反三角条件 $|S_1 - S_2| \le S \le S_1 + S_2$ 时为零。

(ii) 设 $\{|\Psi_{SM}\rangle\}$、$M = -S$、……、S 是一组 $2S+1$ 这样的态，它们构成一个多重态的标准基，并遵循方程 (10) 中的相位约定。那么，它们的约化系数相同，即 $\boldsymbol{C}^{SM}_{(a,S_1),\,(b,\,S_2)} = \boldsymbol{C}^{S}_{(a,S_1),\,(b,\,S_2)}$ 对每个 M 都成立。从图示上看，*(i)* 和 *(ii)* 合起来可写为



(18)

其中，自旋投影与约化系数的分离一目了然。在本工作中，出现在一对线的两条线上的自旋标签（即 S_2 出现在 bS_2 和 S_2M_2 线上）是一个取值相同的单一指标：这对线共同携带子系统的一个指标$(S_2,\ b,\ M_2)$，对该指标求和时只求和一次，即对 S_2 求和一次。

第（i）部分涉及复合系统的单个量子态，这正是目标态在任意一次二分时所需的全部内容，因为方程 1中的哈密顿量本征态可以选取为具有确定的S 和 M。这表明，子系统自旋投影的所有依赖性 M_1 和 M_2 都分离到克莱布什–戈尔丹系数中，而这些系数只取决于 SU(2) 的表示论，而与量子态无关。第（ii）部分涉及一组 $2S+1$ 量子态，每个投影对应一个 M。之所以需要它，是因为矩阵乘积态描述的不仅仅是经过收缩的目标态：矩阵乘积态沿 $d-1$ 个键划分，在每个键处，它还为该键左侧或右侧的轨道块定义了一个基（见第 2.4.2节）。这些块态同样具有确定的自旋，因此以 $2S+1$ 态的多重态形式出现。每个块态本身都是一个复合系统的量子态（即将一个较小的连续轨道块与另一个相邻轨道耦合），因此第（i）部分为每个块态赋予一个独立的约化系数 $\boldsymbol{C}^{SM}$。第（ii）部分表明，只需一个约化系数 $\boldsymbol{C}^{S}$ 就足以描述整个多重态，而无需 M依赖。因此，矩阵乘积态的张量每个多重态只需一个条目，而不是每个量子态一个条目，投影M 也从其键指标中消失了。这种简化正是适配总自旋 SU(2) 对称性后，相较于自旋投影的阿贝尔 U(1) 对称性能够进一步压缩量子态的原因，也是本工作所报告的算法改进的来源。

我们注意到，命题 1 是 Wigner-Eckart 定理的量子态形式；熟悉 SU(2) 表示理论的读者可能更熟悉其算符形式，即关于球张量算符矩阵元因式分解的类似表述 [61]。这两种形式本质上等价 [60], ，但对于本文的目的而言，量子态形式更简单，教学上也更直观；只有在实际执行自旋适配 DMRG 的缩并时才需要算符形式 [60, 61],而我们已获得最终的自旋适配矩阵乘积态，并希望将其加载到量子计算机中。

2.4 自旋适配矩阵乘积态

命题1 讨论的是如何将两个子系统的自旋态组合成总自旋态，而矩阵乘积态在每对相邻轨道之间都有一条键。这里，我们回顾如何在矩阵乘积态的每条键上应用命题 1 (ii)，从而得到第 SU(2)节中对称矩阵乘积态的非阿贝尔 2.2 自旋适配版本，其指标标记的是多重态而非单个态，因此能够利用哈密顿量(1) 的完整对称性来压缩量子态表示。

2.4.1 费米子约定

电子是自旋$\frac{1}{2}$ 费米子，因此第 $2d$ 自旋轨道 (i,μ)（第 2.1 节）每个轨道至多容纳一个电子，并且自旋轨道的产生算符和湮灭算符满足标准的反对易关系 $\{a_{i\mu}, a_{j\nu}\} = 0$ 以及 $\{a_{i\mu}, a^\dagger_{j\nu}\} = \delta_{ij}\delta_{\mu\nu}$。由于不同自旋轨道上的费米子算符反对易，量子态的符号取决于其产生算符的书写顺序，因此我们通过使用占据数为 $\vec{n} \equiv (n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, \cdots\ \ n_{d\uparrow}, n_{d\downarrow})$ 的占据数态来固定这一点，并规定产生算符按照自旋轨道递增的顺序排列，

$$|\vec{n}\rangle \equiv (a^\dagger_{1\uparrow})^{n_{1\uparrow}}(a^\dagger_{1\downarrow})^{n_{1\downarrow}}\cdots(a^\dagger_{d\uparrow})^{n_{d\uparrow}}(a^\dagger_{d\downarrow})^{n_{d\downarrow}}|\mathbf{0}\rangle\,, \tag{19}$$

这与第 2.1 节所选的 Jordan-Wigner 顺序一致。单个空间轨道的福克空间（即某个格点上的两个自旋轨道的并集）由标准占据数基 $\{|\emptyset\rangle\ \ |\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\ \ |\uparrow\downarrow\rangle\}$张成，其中 $|\emptyset\rangle = |00\rangle$在计算基中，以及$|\uparrow\rangle \equiv a^\dagger_\uparrow|\emptyset\rangle$，$|\downarrow\rangle \equiv a^\dagger_\downarrow|\emptyset\rangle$，还有 $|\uparrow\downarrow\rangle = a^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|\emptyset\rangle$。我们将数算符写作 $\hat{}n_{i\mu} \equiv a^\dagger_{i\mu}a_{i\mu}$。

自旋适配矩阵乘积态对每个轨道使用公式9 中的多重态基。轨道 i 的自旋算符由 $\hat{}s_{z,\,i} = \frac{1}{2}(\hat{}n_{i\uparrow} - \hat{}n_{i\downarrow})$给出，

$\hat{s}_{+,i} = a^\dagger_{i\uparrow}a_{i\downarrow}$ 和 $\hat{s}_{-,i} = a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\uparrow}$单占据态由自旋算符相互映射，而所有自旋算符都会湮灭空态和双重占据态，从而得到三个多重态，标记为 $q = (n, s)$，其占据数为 n，自旋为 s [61]:

$$\begin{aligned}(0,0): &\quad |\emptyset\rangle, \\ (1,\tfrac{1}{2}): &\quad |\uparrow\rangle \text{ or } |\downarrow\rangle, \\ (2,0): &\quad |\uparrow\downarrow\rangle,\end{aligned} \tag{20}$$

即：单占据态构成一个双重态，而空态和完全占据态构成两个单重态。在多重态形式中，轨道的局域基矢写作 $|q,\ m\rangle$，表示多重态中投影为 m的量子态 q（由于每个多重态只出现一次，因此无需重数标签）。

矩阵乘积态通过依次将一个轨道与已有的轨道块耦合来构建量子态，因此，要应用第2.3 节的结果，我们必须说明，轨道块的行为类似于公式13中彼此可区分的子系统。这源于公式19 的排序以及相匹配的 Jordan-Wigner 顺序。在 Jordan-Wigner 编码中，某个模式的产生算符带有一串作用于其下方模式的 Z 算符；在公式19中，每个产生算符都先于其下方模式的产生算符作用，发现这些模式均为空，而其算符串贡献 $+1$。因此，量子态 $|\vec{n}\rangle$编码为比特串 $\vec{n}$；对于两个相邻块的占据数态 $|x\rangle$和 $|y\rangle$，同时具有两组占据数的占据数态就是它们的量子比特态的张量积 $|x\rangle \otimes |y\rangle$。由于一个块的自旋算符仅由其自身轨道的费米子算符构成二次形式，因此它们与其他块的费米子算符对易，并且只作用于该张量积中属于自身的因子。于是，命题1 适用于每一条键。

2.4.2 自旋适配矩阵乘积态

掌握这些工具后，我们现在可以回顾自旋适配 MPS 的构造方式；它与第 2.2 节中阿贝尔对称矩阵乘积态的构造方式相同：从右向左扫描，每个格点张量都向右块中再附加一个轨道。将这一方法推广到自旋适配态时，会出现三个关键区别。第一，由于 Wigner-Eckart 定理的结构约化（命题 1），每个指标都标记一个多重态，而非一个态。第二，我们用多重态基而不是占据数基来表示系统，因此物理指标 σ_i 被一个局域多重态 q_i 取代（根据公式20），键指标 α_i 则被右侧轨道块的一个多重态取代。第三，右侧轨道块的基态与新轨道并非像阿贝尔情形那样通过简单的张量积 (6)组合，而是通过克莱布什–戈尔丹耦合组合成具有确定总自旋的态（根据公式 13）。

自旋适配 MPS 是借助第 2.3 节中的工具构造的。第 2.2 节中的阿贝尔荷 $q(\alpha_i)$ 在此由一对量子数取代：键 i 右侧轨道块中的态构成多重态，每个多重态均由粒子数 N_i 和总自旋 S_i标记，它们共同定义一个荷扇区 $\Gamma_i = (N_i, S_i)$（类似于阿贝尔对称 MPS 中块稀疏张量的稠密块由其荷标记的方式）。键指标由一对 (Γ_i, α_i) 定义，其中 α_i 是一个重数指标，用于区分同一扇区中的多重态；键指标的单个取值代表该多重态的所有 $2S_i + 1$ 个态，即$\{|\Gamma_i\alpha_i;\ M\rangle\}_{M=-S_i,\ldots,S_i}$。

类比定义3，自旋适配矩阵乘积态可按照参考文献 [58, 60, 61]中的方法定义：

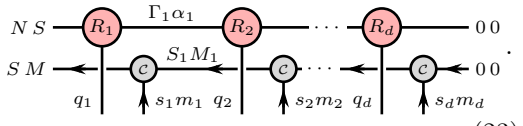
定义5（自旋适配矩阵乘积态）。自旋适配矩阵乘积态是由 $2S + 1$ 个对称等价态 $|\Psi_{SM}\rangle$，$M = -S$，……，S组成的多重态，其总自旋为S，投影为 M，其在局部多重态基 $\psi^{q_1\ldots q_d}_{SM} \equiv \langle q_1 m_1, \ldots\ldots, q_d m_d|\Psi_{SM}\rangle$ (9) 上的振幅可写为

$$\psi^{\vec{q},\vec{m}}_{SM} = \sum_{\{\Gamma_i\alpha_i M_i\}} \prod_{i=1}^{d} (R_i^{q_i})_{(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}),(\Gamma_i\alpha_i)}\, \mathcal{C}^{S_{i-1}M_{i-1}}_{S_iM_i;\,s_im_i}, \tag{21}$$

其中，约化张量 R_1，……，R_d对于每个 M 均相同，其元素由荷扇区和重数标签索引。这些元素是参考文献 *[58, 60, 61]*，和 R_i中的约化矩阵元；*[62]*，汇集了参考文献中的简并张量，每种扇区组合对应一个。右边界键定义为仅承载平凡真空多重态 $\Gamma_d = (0, 0)$，左边界键则承载目标扇区的单个多重态 $\Gamma_0 = (N, S)$，其投影为 $M_0 = M$。此外，将 $X_{\Gamma\Gamma'}$ 定义为矩阵 X 在扇区 Γ 与 Γ'之间的块，它是一个由重数指标标记的矩阵，则每个约化张量都满足以下选择定则

$$\begin{aligned}&(R_i^{q_i})_{\Gamma_{i-1}\Gamma_i} = 0 \quad unless \\ &\quad N_{i-1} = N_i + n_i \\ &\quad and \quad S_{i-1} \in \{S_i + s_i,\ |S_i - s_i|\}.\end{aligned} \tag{22}$$

定义5 在图形表示法中更加直观，其中振幅可以写成

$\psi^{\vec{q},\vec{m}}_{SM} =$ 

. (23)

在这里，我们可以看到，约化张量（红色）携带了量子态特有的全部信息，每个多重态对应一个键指标值；而克莱布什-戈丹系数（灰色）则编码了由对称性确定的信息，将每个多重态展开为其 $2S_i + 1$个态。根据 Wigner-Eckart 定理，与量子态相关的部分和与对称性相关的部分可以因子分解

完全体现在公式中23：没有键线连接这两个结构。

将一个单占据轨道与右侧轨道块耦合，根据三角条件 (12) ——选择规则 (22)，可以使总自旋升高或降低，因此，对于相同的 S_{i-1} 和 q_i ， Γ_i，下一个自旋有两种可能取值 [20]。也就是说，格点右侧的标签无法通过简单的阿贝尔融合规则唯一确定其左侧的标签，因此不能直接利用参考文献 [20]中的协议；我们方法的主要目的是提出一种电路构造，明确处理这种非阿贝尔分支，并相应节省所需的量子资源。

对于每个 M ，量子态 $|\Psi_{SM}\rangle$ 按照定义 1的含义，也是一种普通的矩阵乘积态，其物理指标为 ($q_i m_i$) ，键指标为 $(\Gamma_i \alpha_i M_i)$。其格点张量记为 T_i，它们是方程 (21)中乘积的因子：

$$\begin{aligned}\big(T_i^{(q_i m_i)}\big)_{(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}M_{i-1}),(\Gamma_i\alpha_i M_i)} \\ = (R_i^{q_i})_{(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}),(\Gamma_i\alpha_i)}\, \mathcal{C}_{S_i M_i;\, s_i m_i}^{S_{i-1}M_{i-1}}.\end{aligned} \tag{24}$$

在占据数基下读取时，该 MPS 守恒粒子数和自旋投影，也就是说，它是阿贝尔对称矩阵乘积态（定义 3），因此具有块稀疏结构。我们将其称为量子态 [20, 69] 的非自旋适配形式。

我们始终采用右正则规范，即令 T_i 满足方程 (4)。Clebsch-Gordan 系数在此条件中消去（参见引理 1(iii) 的证明），仅留下约化张量满足的等距条件：

$$\Big(\sum_{q_i} R_i^{q_i} (R_i^{q_i})^\dagger\Big)_{\Gamma_{i-1}\Gamma_{i-1}} = \mathbb{1}, \tag{25}$$

对键 $i-1$ 的每个扇区 Γ_{i-1}。

与阿贝尔情形 (6)一样，量子态从右侧开始逐个轨道构建。在每个格点，轨道i 首先与右块的一个多重态 $|\Gamma_i\alpha_i$耦合； $M\rangle$ 根据方程 (13) 进行耦合（将右块作为第一子系统，轨道作为第二子系统），

$$\begin{aligned}|\Gamma_i\alpha_i, q_i; S_{i-1}, M\rangle = \sum_m \mathcal{C}_{S_i M-m;\, s_i m}^{S_{i-1}M} \\ \times |q_i, m\rangle \otimes |\Gamma_i\alpha_i; M-m\rangle\,,\end{aligned} \tag{26}$$

而约化张量随后将耦合态组合起来，

$$\begin{aligned}|\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}; M\rangle = \sum_{q_i,\Gamma_i,\alpha_i} (R_i^{q_i})_{(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}),(\Gamma_i\alpha_i)} \\ \times |\Gamma_i\alpha_i, q_i; S_{i-1}, M\rangle\,,\end{aligned} \tag{27}$$

对于 $M = -S_{i-1}$、…、 S_{i-1}，从真空态开始$|\Gamma_d$， 1; $0\rangle = |\mathbf{0}\rangle$并以 $|\Gamma_0$、 1; $M\rangle = |\Psi_{SM}\rangle$结束。这里，方程(20)中的双重态是标准基(10)，因为$\hat{s}_- |\uparrow\rangle = +|\downarrow\rangle$。

在右规范中，右块态随后具有以下结构。

命题2 （右块态）。 在右正则规范下，每个键上的右块态 $|\Gamma_i\alpha_i$； $M\rangle$、 $M = -S_i$、 . . . 、 S_i均正交归一；对于每个（Γ_i, α_i） ，它们构成轨道$i+1, \ldots, d$中粒子数为 N_i 、自旋为 S_i 的一个多重态的标准基。每个具有确定 N和 S 的多重态都有这种形式的表示。

正交归一性是自旋适配 DMRG 的正交条件 [58], , 其存在性则可由非对称态分解为多重态得出 [59, 62]。

我们用 $n_\Gamma^{(i)}$ 表示键 i上扇区 Γ的多重态数。于是，自旋适配矩阵乘积态在键 i上有两种不同的键维数概念：多重态数 $\chi_i = \sum_\Gamma n_\Gamma^{(i)}$ ，即约化张量的键指标取值范围（$\Gamma_i\alpha_i$）；以及这些张量所张成的态数 $\chi_i^* = \sum_\Gamma n_\Gamma^{(i)}\,(2S_\Gamma+1)$ ，即非自旋适配形式的键指标取值范围（$\Gamma_i\alpha_i M_i$）。我们记作 $\chi = \max_i \chi_i$（即自旋适配键维数 χ 是键上的多重态数）和 $\chi^* = \max_i \chi_i^*$ （即非自旋适配键维数 χ^* 是键上的态数）。从此处起，未加限定的“键维数”均指自旋适配 χ。对于总自旋为 $S > 0$的多重态目标态，按右块和左块描述时，键上的多重态数可能不同； χ_i 始终统计右块的多重态数。对于单重态，这两种描述一致。

2.5 幺正群方法

自旋适配矩阵乘积态是逐个轨道构建的，并在每条键上记录迄今构建的块的粒子数和自旋。这些标签与幺正群方法 （UGA）中 Paldus [75] 提出的自旋适配基态描述所用的标签相同，其图形形式（GUGA）则由 Shavitt 提出 [76, 77]。第 3 节将利用这种对应关系；下面我们介绍其所依据的 UGA 概念。

步和步向量。假设我们想将一个轨道 i 附加到键 i右侧的轨道块上，该键位于扇区 $\Gamma_i = (N_i, S_i)$。选择定则 (22) 限制了扩展后块的扇区 Γ_{i-1} 最多只能取四个值，我们将这四种可能的跃迁或步记为$\delta_i \in \{0, 1, 2, 3\}$ [75, 82]。添加的轨道可以为空（$\delta_i = 0$）、单占据且使块的自旋升高 1 2（$\delta_i = 1$）、单占据且使块的自旋降低 1 2（$\delta_i = 2$，这要求$S_i > 0$），也可以双占据（$\delta_i = 3$）。我们将其总结于表1。每一步都会使扇区发生固定的增量 $f(\delta) = (\Delta N, \Delta S)$，满足

$$\Gamma_{i-1} = \Gamma_i + f(\delta_i). \tag{28}$$

表1：**格点的四个步骤：**轨道的占据数、其局域多重态 q_δ，以及块的扇区的增量 $f(\delta) = (\Delta N,\ \Delta S)$。

δ	轨道	q_δ	ΔN	ΔS
0	空	$(0,\ 0)$	0	0
1	单占，正耦合	$(1,\ 1_-2)$	1	$+\frac{1}{2}$
2	单重、负耦合	$(1,\ 1_-2)$	1	$-\frac{1}{2}$
3	双重	$(2,\ 0)$	2	0

步 1 和 2 分别称为正自旋耦合和负自旋耦合 [83]。它们的局域多重态都是 $(1, 1_-2)$，区别在于它们对块的自旋所产生的影响，而非轨道自身自旋的投影。我们用 q_δ 表示步 δ 的局域多重态，并将步向量 定义为序列 $\boldsymbol{\delta} = (\delta_1, \ldots, \delta_d)$，其中包含所有轨道对应的步。

幺正群文献按递增顺序排列轨道 [46, 75, 82]，，但由于我们的键以右块标记，因此我们按递减顺序排列：这一步 δ_i 将轨道块$i+1,\ \ldots,\ d$变为轨道块 $i,\ \ldots,\ d$。因此，下面的构造是标准构造，只是轨道顺序反了过来。

构型态函数。沿着块自旋 S_i 始终不为负的步向量，描述了一条从真空态$\Gamma_d = (0, 0)$到扇区 $\Gamma_0 = (N, S)$ 的扇区路径。它还描述了一个态多重态，我们将其记为 $|N, S, M;\ \boldsymbol{\delta}$（其中 $M \in \{-S, \ldots, S\}$）。从真空态开始，通过公式（13）的耦合，我们按 $d, d-1, \ldots, 1$ 的顺序逐个添加轨道。每次添加一个轨道 i 时，第一子系统由块构成，而局域多重态q_{δ_i}中的轨道则构成第二子系统。二者耦合到由 δ_i诱导的自旋 S_{i-1}。添加最后一个轨道后便得到该多重态。这些量子态是谱系耦合方案中的构型态函数（CSF），即斯莱特行列式的自旋适配对应物。用第2.4.2节的术语来说，CSF 是键维数为一的自旋适配矩阵乘积态：每条键上只有一个多重态，对应于路径在该键处的扇区；每个约化张量中也只有一个非零元素（等于一）。根据公式（21），其振幅为

$$\langle q_1 m_1, \ldots, q_d m_d | N, S, M; \boldsymbol{\delta} \rangle = \sum_{\{M_i\}} \prod_{i=1}^{d} C^{S_{i-1} M_{i-1}}_{S_i M_i;\, s_i m_i}, \tag{29}$$

如果在每个格点上为 $q_i = q_{\delta_i}$，否则为零。自旋$S_0, \ldots, S_d$ 对应于由步向量确定的路径上的自旋，而求和遍历投影 $M_1, \ldots, M_{d-1}$，其中 $M_0 = M$、$M_d = 0$。对于每个 M，组态态函数构成 N 个电子、总自旋为 S 且投影为 M [46, 75]。UGA 通常固定 $M = S$；我们允许任意 M，如参考文献 [46], 所述，因为第 3 节的量子电路可制备任意投影。

例如，考虑两个轨道中的两个电子，其总自旋为 $S = 0$。从真空态到扇区 (2，0) 有三种步向量可达。步向量$\boldsymbol{\delta} = (2，1)$ 会经过中间键上的 $(1，\ 1_-2)$：轨道 2 将自旋从 0 提高到 1_-2，而轨道 1 又将其降低回 0。相应的组态态函数将轨道 2 的双重态作为克莱布施－戈丹系数的第一个输入，与轨道 1 的双重态耦合，得到开壳层单重态

$$|2, 0, 0; (2, 1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a^\dagger_{1\downarrow} a^\dagger_{2\uparrow} - a^\dagger_{1\uparrow} a^\dagger_{2\downarrow} \right) |\mathbf{0}\rangle . \tag{30}$$

两个闭壳层构型分别通过步向量 (3，0) 和 (0，3) 得到。

Shavitt 图。组态态函数可以用 Shavitt 图 [76, 77] (参见图 2) 紧凑地表示。其节点是由k 个轨道组成的块的扇区 (N, S)（其中 $k \in \{0, \ldots, d\}$），并按k排列成若干层。如果两个相邻层上的节点相差一个步的增量，则用一条边连接这两个节点，具体总结见表1。因此，步向量可以表示为图上的一条游走，从真空态出发，到达目标扇区。在给定节点结束的游走，与该扇区中该块的组态态函数多重态一一对应 [82, 83]，；选择一条游走和一个投影 M，即可得到一个组态态函数。该图远小于它所表示的基。对于偶数 d，通往 $N = d$ 的单重态的游走总共经过 $(d+2)(d+3)(d+4)/24$ 个节点，而组态态函数的数量则按 $4^d/d^2$ [83] 增长。节点数仅能限定每条键上扇区的数量，不能限定自旋适配矩阵乘积态的键维数，因为每个扇区都可以包含许多多重态。

群论意义。 这些步也有表示论解释 [46]。轨道旋转 U(d) 和自旋群 SU(2) 在福克空间上以可交换的方式作用，该空间分解为

$$\bigwedge (\mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^2) \cong \bigoplus_{N,S} W^{\mathrm{U}(d)}_{(N,S)} \otimes V_S, \tag{31}$$

对于每个扇区，都对应 U(d) 的一个不可约表示 $W^{\mathrm{U}(d)}{}_{(N,\ S)}$。这种分解对于任意轨道块都成立。如果 U($k$) 表示最后$k$ 个轨道的旋转，则其不可约表示也由该块的扇区标记。当从 U(k) 变为 U($k-1$)（即从该块中移除一个轨道）时，U(k) 的每个不可约表示都可以分解为 U($k-1$) 的不可约表示，对于每个允许的步向量 [46]，恰好对应其中一个。通过从 U(d) 逐步降至 U(1)，我们看到，$W^{\mathrm{U}(d)}{}_{(N,\ S)}$ 的每个基向量都由一连串的

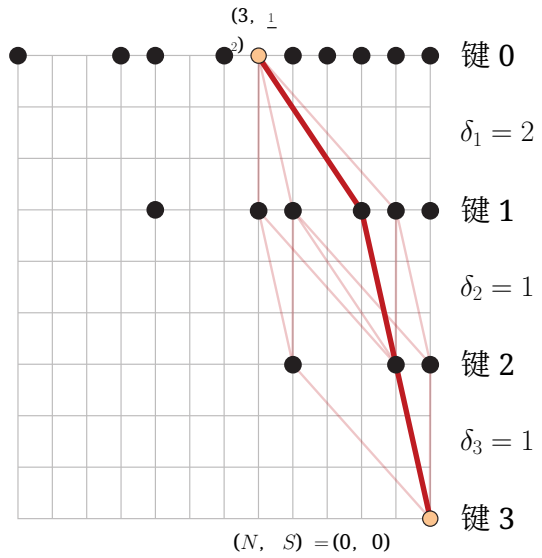


图 2： **个轨道的 Shavitt 图**。每个圆点代表右块的一个扇区（N， S），其高度等于块中的轨道数，且位于真空态左侧 $2(N - S)$ 的距离处（每个网格列为一个单位），因此四个步的斜率各不相同。真空态和目标扇区以黄色标出。浅色线条是从真空态到扇区（3，1 2）的八条游走的边，每条游走对应该扇区的一个 CSF 多重态。粗线表示步向量 $\boldsymbol{\delta} = (2, 1, 1)$ 对应的游走。由于键按右块标记，第一条边属于轨道 3，最后一条边属于轨道 1。

步组成，即一个步向量。以这种方式构造的基称为 Gelfand–Tsetlin 基 [83]。对于每个 M，组态态函数是该基中的向量与 $|S,\ M\rangle$的张量积，且只差一个相位因子 [46]。特别地，方程（9）中的重数标签 a可以取为一个步向量。

量子 Paldus 变换。Burkat 和 Fitzpatrick [46] 提出了一种量子电路，即量子 *Paldus* 变换，用于实现组态态函数与步向量之间的基变换。它是一种等距映射，将存储在占据数基中、对应于各轨道的 $2d$ 个量子比特上的一个组态态函数，以及初始化为 $|0\rangle$ 的三个辅助寄存器，映射为由四个寄存器构成的乘积态，

$$|0\rangle\,|0\rangle\,|0\rangle \otimes |N, S, M; \boldsymbol{\delta}\rangle \;\mapsto\; |N\rangle\,|S\rangle\,|M\rangle\,|\boldsymbol{\delta}\rangle\,. \quad (32)$$

这里， N、 S和 M各自以二进制形式写在$\mathcal{O}(\log\ d)$个量子比特上，步向量占据轨道的 $2d$ 个量子比特（每一步两个量子比特）。该量子电路是 d 个Clebsch–Gordan 变换的级联，每个轨道对应一个。其中每一个通过由 S 和 M 寄存器控制的旋转，将其轨道的占据数转换为一步，然后相应地更新 N、 S和 M 寄存器。总计，该量子电路施加 $d(d + 1)(d + 2)/6$ 次受控旋转，文献 [46]报告的容错成本为$\mathcal{O}(d^3)$个托佛利门。当反向作用于 $|N\rangle\,|S\rangle\,|M\rangle\,\sum_{\boldsymbol{\delta}} c_{\boldsymbol{\delta}}\,|\boldsymbol{\delta}\rangle$时，其中每个 $\boldsymbol{\delta}$ 都是通向扇区的有效游走(N, S)，它将辅助寄存器返回到 $|0\rangle$ 并制备$\sum_{\boldsymbol{\delta}} c_{\boldsymbol{\delta}}\,|N, S, M; \boldsymbol{\delta}\rangle$，其成本不依赖于量子态。文献 [46]按递增顺序附加轨道，我们在第3.3节中将该变换与我们的顺序联系起来。

3 结果

自旋适配矩阵乘积态将每个多重态压缩为原来的 $2S + 1$，方法是仅存储一个振幅；在此我们构造一种态制备电路，其成本体现了这种压缩。参考文献 [20]中的协议不能直接应用于自旋适配矩阵乘积态，因为该协议假设了可加阿贝尔选择规则 (5)，在这种规则下，局域态决定键电荷如何变化。如第 2.4.2 节所述，自旋融合并不遵循这种规则，因为单占据轨道既可以提高也可以降低与其耦合的系统的总自旋。这一障碍可以分三个阶段消除：

1. 重标记：采用幺正群方法（第 2.5 节）的约定，根据每个格点的步（表 1）而不是其局域态为格点标记。用步表示时，扇区标签是可加的，约化张量变为每个格点具有四个局域态的阿贝尔对称矩阵乘积态（引理 1）。这只是对振幅进行简单的经典重标记，不会增加任何额外成本。

2. 加载：重新标记将问题“阿贝尔化”，使我们能够直接应用参考文献中的块稀疏制备。 [20]，从而高效加载一个定义在步向量上的矩阵乘积态，其扇区标签如同阿贝尔荷（推论 1），且成本可按所需由多重态数决定。

3. 耦合：此时寄存器中存储的是酉群方法的步，而非占据数。在每个格点，逆克莱布施-戈登变换（由对称群几何确定的固定变换）会将单占轨道对应的步转换为正确的自旋态叠加（第 3.3 节），从而得到占据数基中的目标量子态。其成本取决于轨道数，但与键维数无关；与数据加载成本相比，可以忽略不计。

第二和第三阶段可以按格点交错进行，从键寄存器而非单独的自旋寄存器中读取自旋；当键寄存器显式存储扇区时，这样可以略微节省资源；无论采用哪种方式，差别都很小（第 3.5 节）。最终得到一个量子电路，可为任意投影准备量子态 M（定理 1 和图4），其成本主要

由步向量 MPS 加载决定，而后者本身取决于多重态数 χ （第3.5 节），而非完整的键维数 $\chi^* > \chi$。

3.1 自旋适配矩阵乘积态是定义在步向量上的阿贝尔对称矩阵乘积态

因此，我们将约化张量的物理（多重态）指标 q_i 重新标记为表 1中的步，以便将其映射为适用于量子态制备的形式：

定义 6 (步向量矩阵乘积态)。自旋适配矩阵乘积态的步向量矩阵乘积态是定义在 d 个局部维数为 $D = 4$ 的格点上的矩阵乘积态，其张量 A_i^δ, $\delta \in \{0, 1, 2, 3\}$（即步向量张量）为

$$(A_i^\delta)_{\Gamma_{i-1}\Gamma_i} = (R_i^{q_\delta})_{\Gamma_{i-1}\Gamma_i}, \tag{33}$$

若 $\Gamma_{i-1} = \Gamma_i + f(\delta)$，否则为 0。将这些张量收缩后，得到量子态

$$|\Phi\rangle = \sum_{\boldsymbol{\delta}} c_{\boldsymbol{\delta}} \, |\delta_1\rangle \, |\delta_2\rangle \cdots |\delta_d\rangle \, , \quad c_{\boldsymbol{\delta}} = A_1^{\delta_1} A_2^{\delta_2} \cdots A_d^{\delta_d} . \tag{34}$$

每个 $c_{\boldsymbol{\delta}}$ 都是标量，因为自旋适配矩阵乘积态的两个边界键都是平凡的（定义 5）。

步向量张量包含与约化张量相同的振幅，只是重新进行了标记（见下文引理 1(ii)）。固定物理指标后，将每个 A_i^δ 视为矩阵，其行列结构与对应的 $R_i^{q_\delta}$ 相同；条件 $\Gamma_{i-1} = \Gamma_i + f(\delta)$ 仅将其中一些块置零。该条件仅适用于 $\delta \in \{1, 2\}$，因为选择定则 (22) 已对 $\delta \in \{0, 3\}$ 强制满足该条件，因此 $A_i^0 = R_i^{(0,0)}$ 和 $A_i^3 = R_i^{(2,0)}$。对于 $\delta = 1$和 $\delta = 2$，该条件会将 $R_i^{(1,1/2)}$ 中的非零块分成两类：正自旋耦合块归入 A_i^1，负自旋耦合块归入 A_i^2。我们在图 3 中以图示方式展示了这种拆分。该映射具有以下性质：

引理 *1*（自旋适配矩阵乘积态的步向量映射）。设 $R_1, \ldots, R_d$ 是自旋适配矩阵乘积态（定义 *5* ）的张量，表示多重态 $\{|\Psi_{SM}\rangle\}_{M=-S,\ldots,S}$，并设 $|\Phi\rangle$ 是其步向量矩阵乘积态的量子态 *(34)*。则：*(i)* 选择加性荷为一对 $\Gamma = (N, S)$，由键指标 $(\Gamma_i \alpha_i)$ 携带为 Γ_i ，并由局域态 $|\delta\rangle$ 携带为 $f(\delta)$，则步向量矩阵乘积态（定义 *6*）是阿贝尔对称 *MPS*（定义 *3*）。*(ii)* 选择定则 *(22)* 允许的约化张量 R_i^q 的每个元素，恰好是一个步向量张量 A_i^δ 的元素。*(iii)* 当且仅当自旋适配矩阵乘积态是右规范的，步向量矩阵乘积态也是右规范的，$\sum_\delta A_i^\delta (A_i^\delta)^\dagger = \mathbb{1}$。*(iv)* 对于任意自旋投影 M，将每个步基态替换为 *CSF* $|\Phi\rangle$，即可从 $|\Phi\rangle$ 得到目标态

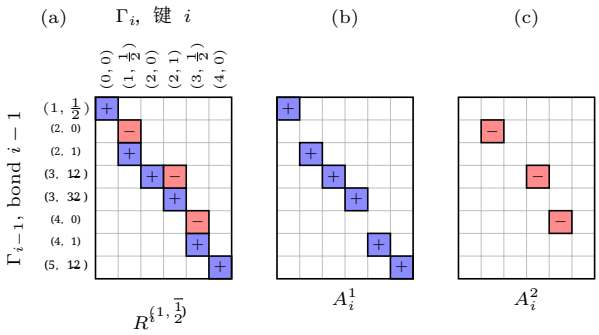


图 3： **定义 6 在一个格点处的图示**。这里，我们考虑一个 i 右侧有两个轨道的自旋适配矩阵乘积态。每个面板描绘张量 R_i 或 A_i的一个矩阵切片，其行和列分别标记为键 $i-1$ 和 i的扇区，因此每个方格都是一个块 $X_{\Gamma_{i-1}\Gamma_i}$；白色方格为零，蓝色方格是具有正自旋耦合的振幅块，红色方格是具有负自旋耦合的振幅块。 **(a)** 约化张量的切片 $R_i^{(1,1/2)}$，对应于一个单占据轨道。 **(b、c)** 步向量张量 A_i^1 和 A_i^2 分别保留正耦合块和负耦合块，且元素相同。

$|\delta_1\rangle \cdots |\delta_d\rangle$，同时保留振幅，即得到 *CSF* $|N, S, M; \boldsymbol{\delta}\rangle$：

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= \sum_{\boldsymbol{\delta}} c_{\boldsymbol{\delta}} \, |\delta_1\rangle \cdots |\delta_d\rangle \\ \mapsto \quad |\Psi_{SM}\rangle &= \sum_{\boldsymbol{\delta}} c_{\boldsymbol{\delta}} \, |N, S, M; \boldsymbol{\delta}\rangle \, , \end{aligned} \tag{35}$$

对于所有 $2S+1$ 投影，振幅均为 $c_{\boldsymbol{\delta}}$。只有作为合法路径的步向量（从真空到 (N, S)，且自旋从不为负）具有组态态函数，而其他每个步向量都有 $c_{\boldsymbol{\delta}} = 0$。

证明。 **(i)** 定义 3 中的格点电荷由 $\hat{Q}_i = \sum_\delta f(\delta) \, |\delta\rangle\langle\delta|$ 给出，它在步基中是对角的。根据方程（33）， A_i^δ 的非零块满足$\Gamma_{i-1} = \Gamma_i + f(\delta)$，这就是选择定则（5），其中键电荷为 Γ_i，格点电荷为 $f(\delta)$。根据定义 5，右边界键携带 $\Gamma_d = (0,0)$ 。

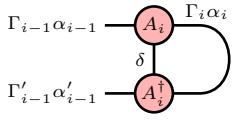
(ii) 选择一个格点 i 和一个块 $(R_i^{q_i})_{\Gamma_{i-1}\Gamma_i}$，该块须符合选择定则 (22)。我们依次考察每个局域多重态。未占据或双占据的轨道很简单：对于 $q_i = (0, 0)$，选择定则给出 $N_{i-1} = N_i$ 和 $S_{i-1} = S_i$，即第 0 步的增量；这是该局域多重态唯一对应的步。同样， $q_i = (2, 0)$ 给出 $N_{i-1} = N_i + 2$ 和 $S_{i-1} = S_i$，即第 3 步的增量。对于单占据情形 $q_i = (1, 1\,2)$，选择定则给出 $N_{i-1} = N_i + 1$ 和 $S_{i-1} \in \{S_i + \frac{1}{2}, |S_i - \frac{1}{2}|\}$。对于 $S_i > 0$，它们是两个不同的值 $S_i \pm \frac{1}{2}$，分别是第 $\delta = 1$ 步和第 $\delta = 2$ 步的增量，因此这两个值中恰有一个必须与该块相符。对于 $S_i = 0$ ，选择定则 (22) 允许的两个值重合为 $S_{i-1} = \frac{1}{2}$ ，而只有第 $\delta = 1$ 步能达到该值；第 $\delta = 2$ 步会使自旋降至 $-\frac{1}{2}$。在每种情况下，恰有一个步 δ 满足 $q_\delta = q_i$

且 $\Gamma_{i-1} = \Gamma_i + f(\delta)$，因此根据方程（33），该块仅属于那个 A_i^δ。

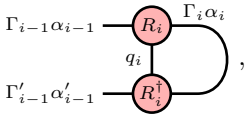
(iii) 我们通过第三个条件来比较这两个条件，该条件仅涉及约化张量：对于每个键 Γ_{i-1} 的扇区 $i-1$，式（$i-125$） $\sum_{q_i} R_i^{q_i}$。下文将证明，在这两个条件中的每一个条件下，该求和在键 $R_i^{q_i}$ 的扇区中都是块对角的，并且其对角块分别是 $\dagger$ （Γ_{i-1}）中的对角块（对于自旋适配矩阵乘积态，还需在投影上乘以恒等变换）。因此，当且仅当对每个 $i-1$ 都满足式（25）时，每个求和才是恒等变换，所以这两个条件总是同时成立或同时不成立。

步向量矩阵乘积态。对 A_i^δ 及其伴随的缩并计算如下

$$\Big(\sum_\delta A_i^\delta (A_i^\delta)^\dagger\Big)_{\Gamma_{i-1}\Gamma'_{i-1}} =$$



$$= \delta_{\Gamma_{i-1}\Gamma'_{i-1}}$$



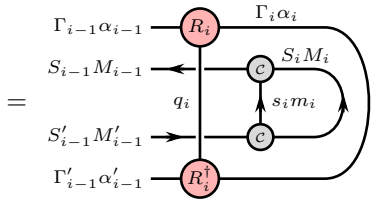
, (36)

这里，我们将式 33 应用于每一项的两半部分；它们共享 δ 和 Γ_i，并利用（ii）将关于 δ 的求和转换为关于 q_i的求和。因此，该条件就是式（25）。

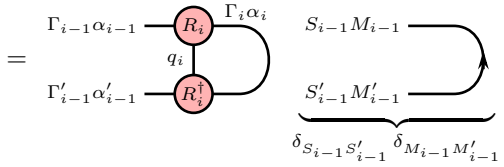
自旋适配矩阵乘积态。其条件是格点张量4的式 T_i，每个格点张量均作为图（23）中的一个格点绘制：

$$\Big(\sum_{q_i,\ m_i} T^{(q_i m_i)\, i}\big(T^{(q_i m_i)\, i}\big)^\dagger\Big)_{(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}M_{i-1}),\ (\Gamma'_{i-1}\alpha'_{i-1}M'_{i-1})}$$

$=$



$=$



. (37)

由于 q_i 和 Γ_i 是共享的，选择定则（22）也给出 $N_{i-1} = N'_{i-1}$，因此右侧为$\delta_{M_{i-1}M'_{i-1}}$，且条件再次为公式（25）。

(iv) 按扇区序列对方程（21）中的各项进行分组 Γ_0，……，Γ_d。根据（ii），每个这样的扇区序列对应一个步向量 $\boldsymbol{\delta}$。对于固定的$\boldsymbol{\delta}$，约化张量元素只取决于重数指标和克莱布什–戈尔丹系数只取决于投影，因此方程（21）可因式分解为：

$$\begin{aligned}\psi_{SM}^{\vec{q},\vec{m}} &= \sum_{\boldsymbol{\delta}} \Big[\sum_{\{\alpha_i\}} \prod_{i=1}^{d} (R_i^{q_i})_{(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}),(\Gamma_i\alpha_i)}\Big] \\ &\quad \times \Big[\sum_{\{M_i\}} \prod_{i=1}^{d} \mathcal{C}_{S_iM_i;\, s_im_i}^{S_{i-1}M_{i-1}}\Big] \\ &= \sum_{\boldsymbol{\delta}} c_{\boldsymbol{\delta}} \langle q_1 m_1, \ldots, q_d m_d | N, S, M; \boldsymbol{\delta}\rangle ,\end{aligned} \tag{38}$$

其中，每一项中的扇区 Γ_i 是路径 $\boldsymbol{\delta}$上的扇区。根据方程（33），第一个括号为 $A_1^{\delta_1}\cdots A_d^{\delta_d} = c_{\boldsymbol{\delta}}$，第二个括号为公式（29）。由此得到公式（35）的第二行，其系数即为 $|\Phi$ 的系数，这是根据公式（34）得出的。对于非法路径，公式（33）的条件逐个键确定 $c_{\boldsymbol{\delta}} = A_1^{\delta_1}\cdots A_d^{\delta_d}$的扇区，即 $\Gamma_{i-1} = \Gamma_i + f(\delta_i)$，从 $\Gamma_d = (0,0)$ 开始。若要到达负自旋，或终止于不同于 (N,S) 的扇区，就必须有某个键携带了它实际上并不携带的扇区，因为没有键具有负自旋，而键 0 只携带 (N,S)；因此，在这些情况下，$c_{\boldsymbol{\delta}} = 0$。 □

3.2 步向量矩阵乘积态的制备

引理 1 通过将自旋适配态表示为阿贝尔对称矩阵乘积态，使其适用于参考文献 [20]；现在我们展示如何高效制备步向量矩阵乘积态。矩阵乘积态通常按序逐个格点制备，使用一个含有$\lceil \log_2 \chi \rceil$ 个量子比特的键寄存器，承载已制备格点与链中其余部分之间的纠缠[18–20, 34]。通过让键寄存器沿着尚未初始化的物理位点量子比特“浮动”，可以节省 $\lceil \log_2 \chi \rceil$ 个辅助量子比特。我们在文献中未发现这种节省方法，并在附录 B中予以证明。键寄存器初始化为量子态 $|\alpha_0\rangle$；在每个格点$i = 1,\ldots,d$ 上，一个幺正算子作用于该寄存器以及格点 i的寄存器上，后者初始化为 $|0\rangle$，形式如下：

$$|\alpha_{i-1}\rangle\,|0\rangle \mapsto \sum_{\sigma_i,\alpha_i} (M_i^{\sigma_i})_{\alpha_{i-1}\alpha_i}\,|\alpha_i\rangle\,|\sigma_i\rangle\,, \tag{39}$$

根据右规范条件，该矩阵是一个等距映射（4）（因为各列是正交归一的）；因此，该幺正算子只需复现这些列，而等距映射综合相应地可以分解为规模更小的幺正综合问题 [19]。对于阿贝尔对称矩阵乘积态，可以遵循文献 [20], 中的协议，将行和列重新排列为块对角形式，并行综合各个块，其成本主要由最大块的大小决定（而不是这些大小之和，即键维数 χ）。因此，作为引理 1的推论，以此成本进行制备便可直接得到：

推论1（步向量矩阵乘积态的制备）。将自旋适配矩阵乘积态置于右正则规范下。则：

（***i***）格点 i 在公式（39）中的矩阵是块稀疏的，对于键 $i-1$上的每个扇区 Γ，均有一个块 $n_{\Gamma}^{(i-1)}$，其列正交归一，每列对应该扇区的一个多重态，并且

$$h_{\Gamma}^{(i)}=\sum_{\delta=0}^{3} n_{\Gamma-f(\delta)}^{(i)} \tag{40}$$

行，其中 $n_{\Gamma'}^{(i)}=0$ 对于扇区 Γ'，该扇区不会出现在键 i上。参考文献 *[20]*中的块稀疏制备因此无需修改即可应用，并以该参考文献针对这些尺寸的块所需的 *Toffoli* 门数量制备量子态 (34)。

(ii) 设目标态为单重态，且其自旋适配矩阵乘积态是最简的，即目标态的任何自旋适配矩阵乘积态在任意键上的任意扇区中都不包含更少的多重态。那么，目标态 $|\Psi_{00}\rangle$写成右规范的 $\mathrm{U}(1)\times\mathrm{U}(1)$-对称 ***MPS***，且每个键上的键维数都等于该处的施密特秩，其结构与 ***(i)*** 相同，只是将扇区 Γ 替换为荷 (N',m)，并将多重态的数量 $n_{\Gamma}^{(i)}$ 替换为态的数量

$$c_{(N',m)}^{(i)}=\sum_{S'\geq|m|} n_{(N',S')}^{(i)}, \tag{41}$$

其中求和遍历自旋，且 $S'-m$ 为整数：键 $i-1$的每个荷对应一个块，该块含有$c^{(i-1)}{}_{(N',m)}$ 个正交归一列和 $\sum_{\sigma} c^{(i)}{}_{(N'-n_\sigma,\,m-m_\sigma)}$行，其中 (n_σ,m_σ) 是占据态 σ的荷。对所有块计数，自旋为 S'的一个多重态在 ***(i)*** 中对应一列，而在这里对应 $2S'+1$列，每个 $2S'+1$ 块中各一列；这里一个含有 $|m|\leq\frac{1}{2}$ 的块包含其粒子数下所有自旋的多重态，而 ***(i)*** 中的一个块只包含一种自旋的多重态。

证明。 **(i)** 每一行 $(\delta,\ \Gamma_i,\ \alpha_i)$ 矩阵都恰好属于一个块，即扇区 $\Gamma_{i-1}=\Gamma_i+f(\delta)$对应的块。 Γ 因此，对于至多四个步中的每一步，都会堆叠约化张量的块 $(R_i^{q_\delta})_{\Gamma,\ \Gamma-f(\delta)}$ 其列的正交归一性即为公式（25）。 **(ii)**固定一条键 i。边界键各自承载一个自旋为零的多重态，因此公式（41）对它们直接成立。我们在键 i 处切分目标态，读出右块的约化密度矩阵，统计每个荷对应的态数，并将这些计数填入位点矩阵的各个块中。

切分处的目标态。 在右正则规范下，根据命题 2，右块态$|\Gamma\alpha;\ M\rangle$ 位于键 i 上且彼此正交归一，并且对于每个（Γ，α），它们构成粒子数为 N_Γ、自旋为 S_Γ 的轨道 $i+1$，……，d的一个标准多重态基。将它们补全为这些轨道的一个正交归一多重态基，并在其中展开目标态，

$$|\Psi_{00}\rangle=\sum_{\Gamma,\alpha,M}|X_{\Gamma\alpha M}\rangle\otimes|\Gamma\alpha;M\rangle\,,$$

其在轨道 1，……，i上的矢量为 $|X_{\Gamma\alpha M}$；补全中的各项均为零，因为目标态是通过键 i对 MPS 进行收缩得到的。轨道 1，……，i和 $i+1$，……，d分别构成命题1意义下的子系统（见公式（20）后的讨论）。将其第（i）部分应用于总自旋为 0 的情形，以轨道 1，……，i的正交归一多重态基 $|a$、S_1、M_1作为第一子系统，并以右块作为第二子系统。总自旋为 0 时的三角条件迫使 $S_1=S_\Gamma$，而投影守恒给出 $M_1=-M$，因此

$$|X_{\Gamma\alpha M}\rangle=\mathcal{C}^{00}_{S_\Gamma-M;\,S_\Gamma M}\sum_a\tilde{C}^{\Gamma}_{a\alpha}\,|a,S_\Gamma,-M\rangle\,,$$

其中，矩阵 $\tilde{C}^{\Gamma}$ 不依赖于 M，且有$n_{\Gamma}^{(i)}$ 列。求和遍历自旋为 S_Γ、粒子数为 $N-N_\Gamma$的多重态 a，因为目标态的粒子数为 N且 $|\Gamma\alpha;\ M\rangle$具有 N_Γ。

右块的约化密度矩阵。在两个正交归一基 $|a,S_1,$ M_1和 $|\Gamma\alpha;\ M$ 中，目标态的系数在 (Γ,M) 上呈块对角形式，块为 $\mathrm{C}^{00}_{S_\Gamma-M;\,S_\Gamma M}\tilde{C}^{\Gamma}$。由于 $|\mathrm{C}^{00}_{S-M;\,SM}|^2=(2S+1)^{-1}$，键 i 上的施密特值是 $\tilde{C}^{\Gamma}$ 除以 $(2S_\Gamma+1)^{1/2}$ 后所得矩阵的奇异值，每个值对应 $2S_\Gamma+1$ 个投影 M。克莱布施-戈丹系数的平方等于 $(2S_\Gamma+1)^{-1}$，且态 $|a,S_1,M_1$ 正交归一，因此轨道 $i+1,\ldots,d$ 的约化密度矩阵 ρ 在基 $|\Gamma\alpha;\ M$ 下的元素为

$$\begin{aligned}\rho_{(\Gamma\alpha M),(\Gamma'\alpha'M')}&=\langle X_{\Gamma'\alpha'M'}|X_{\Gamma\alpha M}\rangle\\&=\frac{\delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{MM'}}{2S_\Gamma+1}\big(\tilde{C}^{\Gamma\dagger}\tilde{C}^{\Gamma}\big)_{\alpha'\alpha}.\end{aligned}\tag{42}$$

它是块对角的，每个扇区Γ 和投影 M对应一个块，并且在补全空间中的态上为零。每个块的秩都等于 $\tilde{C}^{\Gamma}$的秩，由于自旋适配矩阵乘积态具有最小性，因此该秩为$n_{\Gamma}^{(i)}$。反之，假设 $\tilde{C}^{\Gamma}$ 的秩为 $r<n_{\Gamma}^{(i)}$。于是存在一个幺正算子 V，使得 $\tilde{C}^{\Gamma}V$的最后 $n_{\Gamma}^{(i)}-r$列为零。将 $|\Gamma\beta;\ M\rangle$替换为 $\sum_\alpha V^*_{\alpha\beta}|\Gamma\alpha;\ M\rangle$，并对每个 M使用相同的 V，会将系数矩阵变为 $\tilde{C}^{\Gamma}V$，同时保持自旋多重态不变。这是在键 i上的规范变换，可吸收到相邻的两个约化张量中；其他键均不发生变化。随后可以从该键中删除向量 $|X\rangle$为零的多重态，而不改变目标态。这与最小性矛盾。

每个荷的态。荷为（$N'm$）的态 $|\Gamma\alpha;\ M$ 是满足 $N_\Gamma=N'$和 $M=m$ 的态。当且仅当 $S'\geq|m|$ 和 $S'-m$ 为整数时，扇区 $\Gamma=(N',S')$ 恰好包含这类态，此时包含其中的 $n_{\Gamma}^{(i)}$ 个，因此，将 ρ 限制在荷 (N',m) 上，其秩为 $c^{(i)}{}_{(N',m)}$。在该陈述中的 U(1) ×U(1)-对称 MPS 中，键为 i 的右块态根据右正则性是正交归一的，并具有确定荷（定义 3）。它们的张成空间包含 ρ 的支撑，因为目标态是对其进行缩并所得的

穿过键 i 的 MPS。其维数就是键维数，因而也是施密特秩，而施密特秩就是支撑的维数。因此，该张成空间就是支撑。轨道 $i+1$、……、d 的荷算符与 ρ 对易，因此 ρ 在荷（N'，m）上的秩，就是具有该荷的基态数量。这就是方程（41）。

位点矩阵的各个块。由于 i是任意的，因此键 $i-1$ 上也同样如此。参考文献 [20] 中的块稀疏制备按照键 $i-1$的荷对位点矩阵的列进行分组，因此荷为（N'，m）的块包含 $c^{(i-1)}$（N'，m）列；由于 U(1) × U(1) 矩阵乘积态是右规范的，这些列彼此正交归一。根据选择定则（5），并以其右侧的轨道为键标记，行（σ，α_i）属于荷为 α_i 加上（n_σ，m_σ）的块，因此（N'，m）的块包含 $\sum_\sigma c^{(i)}$（$N'-n_\sigma$，$m-m_\sigma$）行，其中$c^{(i)}=0$ 表示该荷不在键 i上。参考文献 [20] 以其左侧轨道的荷（N_L，m_L）标记每个键；对于我们的右荷（N_R，m_R），该荷为（$N-N_R$，$-m_R$），因此两种标记方式仅通过对位点矩阵各块进行一一重新标记而有所不同。

多重态计数。对方程（41）求和，m 会针对自旋为 S' 的每个多重态，按其$2S'+1$ 个投影分别计数，涉及 $2S'+1$ 种不同的荷。最 $|\Gamma\alpha;\,M\rangle$ 是一个含有 N_Γ 个电子的非零量子态，而每个电子对自旋投影的贡献为 $\pm\frac{1}{2}$，因此 $M-\frac{1}{2}N_\Gamma$，进而 $S_\Gamma-\frac{1}{2}N_\Gamma$ 是整数。所有出现的荷（N，m）都满足 $m-\frac{1}{2}N$，为整数。对于满足$|m|\le\frac{1}{2}$ 的荷，当 N' 为偶数时有 $m=0$，当 N，为奇数时有 $m=\pm\frac{1}{2}$；无论哪种情况，总和（41）都会遍历粒子数为 N' 的扇区的所有自旋，因为偶数 N' 对应整数，而奇数 N，对应至少为 $\frac{1}{2}$ 的半整数。□

我们简要指出，哈密顿量的阿贝尔点群对称性也可以采用相同方式纳入，即将其作为扇区标签的另一项。阿贝尔点群的每个不可约表示都是一维的，并且可以选择轨道，使得轨道 i 按照其中一个表示 g_i进行变换。键 i右侧块中的量子态随后按照单个不可约表示I_i进行变换，而附加具有 ΔN 个电子的轨道 i 后得到$I_{i-1}=I_i\,g_i^{\Delta N}$。由于一步固定了其轨道的占据数（表1），它也固定了这一变化。因此，扇区可以扩展为 $\Gamma=(N,S,I)$（例如启用了点群对称性的 `block2`所采用的标准标记方式 [69]），此时引理 1 和推论1仍然成立，只需用依赖于格点的增量替代$f(\delta)$，并将位点矩阵的每个块进一步细分为更小的块。第3.3节中的逆克莱布什–戈尔丹变换保持不变，因为点群仅作用于空间轨道，并且与总自旋对易。

3.3 从步向量到占据数

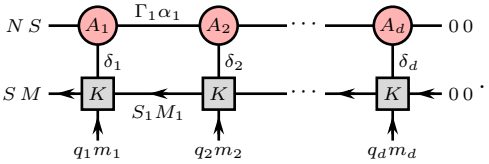
从推论1可知，现在我们能够高效地制备步向量矩阵乘积态 $|\Phi\rangle$。观察方程35，要制备所需的量子态 $|\Psi_{SM}\rangle$，剩下的工作就是实现线性映射 U_M，其中 $U_M\,|\delta_1\rangle\cdots|\delta_d\rangle = |N,\ S,\ M;\ \boldsymbol{\delta}\rangle$定义在合法步向量的张成空间上。由于固定$M$ 的组态态函数是正交归一的，U_M 是从该张成空间映射到具有量子数 (N，S，M)的量子态空间的等距映射。除轨道耦合顺序相反外，它是文献 [46]中量子 Paldus 变换的逆变换；该变换的构造基于他们的方法。

首先，我们定义张量 K，它通过将右侧轨道块的自旋 S'' 与多重态 q_δ中的一个轨道耦合，从而在每个格点上执行这种变换，得到自旋 $S'=S''+\Delta S\,(\delta)$：

$$\left(K^{\delta,(qm)}\right)_{(S'M'),(S''M'')}=\begin{cases}\mathcal{C}^{S'M'}_{S''M'';\,sm} & \text{if } q=q_\delta \text{ and}\\ & S'=S''+\Delta S(\delta),\\ 0 & \text{otherwise,}\end{cases}\tag{43}$$

其中 $q=(n,\ s)$ 且 $\Delta S(\delta)$ 是步 δ（表1）中自旋的变化。该张量与格点和量子态无关，因此我们可以将方程35 改写为：

$$\psi^{\vec{q},\vec{m}}_{SM}=$$



(44)

我们逐个格点应用 U_M，并与第3.2节的格点等距映射交替进行：格点 K 上的 i紧接着轨道 i的格点等距映射 A_i 作用，而键寄存器保存扇区 Γ_i。

要在量子计算机上实现这一点，我们需要一个作用于量子电路寄存器的高效幺正算子。在格点 i，K 按上述写法并未定义这些寄存器上的映射：其矩阵元取决于轨道 i 两侧键所携带的投影 M_{i-1} 和 M_i，而这些投影尚未由任何寄存器保存（键寄存器只保存扇区 $\Gamma_i=(N_i,\ S_i)$，并且按照构造，一个键指标代表其多重态的全部 $2S_i+1$ 个投影）。因此，我们添加一个M 寄存器，用于保存当前键上的投影。它在最左侧的键上被初始化为量子态 $|M\rangle$，即目标态的投影，因为键 0 携带整条链的自旋。格点 i 减去其轨道的投影 m_i，因此在格点 i 之后，该寄存器包含$M_i=M_{i-1}-m_i$，并在末尾包含 $M_d=0$。对于总自旋，我们不需要这样的构造，因为角度只取决于 S_i（该值从键寄存器中读取）和 M_{i-1}，而这一步本身决定自旋是增加还是减少。

对 M 寄存器进行初始化，是我们选择从右到左进行自旋融合的原因：起始

键是唯一可以设置整个量子态投影的位置 M，而从真空态一端开始会导致系统量子比特在结束时与M寄存器纠缠。自旋融合通常是从左向右进行的 [59, 61, 75, 82], ，但在 MPS 态制备中，等距映射通常按从左到右的方向膨胀（右正则规范） [18–20, 34]—不过，由于必须在起始键处设置投影，这两者必须朝相反方向进行，因此我们不得不为其中一个采用反向约定。由于本文讨论的是态制备，我们选择从左到右进行态制备、从右到左进行自旋融合；只需简单反转我们的约定，即可实现相反的顺序。正如附录A中所述， `block2` 以从右到左扫描结束的计算会自动以这种形式给出其张量；与自旋适配 DMRG 代码对接时必须确保这一点，因为不同库的约定差异很大。

现在根据参考文献 [46] 来构造映射本身。回顾一下，在 Jordan-Wigner映射中，轨道 i 的两个量子比特分别跟踪其模式 $(i,\uparrow)$ 和 $(i,\downarrow)$ 的占据情况，对应的占据态为$|\emptyset\rangle = |00\rangle$、$|\uparrow\rangle = |10\rangle$、$|\downarrow\rangle = |01\rangle$ 以及 $|\uparrow\downarrow\rangle = |11\rangle$。在变换之前，我们在相同的两个量子比特上将该步写作 $0 \mapsto |00\rangle$、$1 \mapsto |10\rangle$、$2 \mapsto |01\rangle$ 和$3 \mapsto |11\rangle$。对于空轨道 ($\delta = 0$) 或双重占据轨道 ($\delta = 3$)，该映射是平凡的，因为二者都具有$s_i = 0$，且跨越该键时总自旋及其投影均不发生变化，因此克莱布什–戈尔丹系数为 1，变换就是恒等变换：

$$\begin{aligned} |\delta{=}0\rangle\,|M_{i-1}\rangle &\mapsto |\emptyset\rangle\,|M_{i-1}\rangle\,, \\ |\delta{=}3\rangle\,|M_{i-1}\rangle &\mapsto |\uparrow\downarrow\rangle\,|M_{i-1}\rangle\,, \end{aligned} \tag{45}$$

其中，第二个右矢表示 M 寄存器。对于单占据轨道（$\delta \in \{1,2\}$），电子会使自旋升高或降低，$S_{i-1} = S_i \pm \frac{1}{2}$。我们每次只添加一个自旋[12]，因此不需要使用 Racah 公式的完整形式——克莱布什-戈丹系数只是简单的几何因子，M 寄存器会按轨道的投影递减，因此该变换的其余情形可表示为

$$\begin{aligned} |\delta{=}1\rangle\,|M_{i-1}\rangle &\mapsto \cos\theta\;|\uparrow\rangle\,\big|M_{i-1}-\tfrac{1}{2}\big\rangle \\ &\quad + \sin\theta\;|\downarrow\rangle\,\big|M_{i-1}+\tfrac{1}{2}\big\rangle\,, \\ |\delta{=}2\rangle\,|M_{i-1}\rangle &\mapsto -\sin\theta\;|\uparrow\rangle\,\big|M_{i-1}-\tfrac{1}{2}\big\rangle \\ &\quad + \cos\theta\;|\downarrow\rangle\,\big|M_{i-1}+\tfrac{1}{2}\big\rangle\,, \end{aligned} \tag{46}$$

其中，克莱布什-戈丹系数的几何因子为

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{S_i + M_{i-1} + \frac{1}{2}}{2S_i+1}}, \quad \sin\theta = \sqrt{\frac{S_i - M_{i-1} + \frac{1}{2}}{2S_i+1}}. \tag{47}$$

我们将方程 45ˆ和 46 中实现的线性映射记为 K_{S_i}，应将其视为张量 K 的酉补全，使其能够在量子计算机上实现。它是文献 [46],中克莱布施-戈丹变换的逆变换，其中 S_i 从键寄存器而非自旋寄存器中读取：

引理 2 (逆克莱布什-戈尔丹变换 [46])。ˆ选取一个自旋 $S_i \geq 0$，并将 K_{S_i} 限制为作用于满足自旋 $S_{i-1} = S_i + \Delta S(\delta)$ 非负且 $M_{i-1} \in \{-S_{i-1}, \ldots, S_{i-1}\}$ 的态 $|\delta\rangle\,|M_{i-1}\rangle$ 张成的空间。则：

(i) 的振幅ˆ K_{S_i} 是张量 K （方程 (43)）的元素：

$$\hat{K}_{S_i}\,|\delta\rangle\,|M_{i-1}\rangle = \sum_m \mathcal{C}^{S_{i-1}M_{i-1}}_{S_iM_{i-1}-m;\,sm}\;|q_\delta, m\rangle\,|M_{i-1}-m\rangle\,, \tag{48}$$

其中 s 是 q_δ 的自旋，且 $|q_\delta,\ m\rangle$ 是轨道的两个量子比特上方程 (20) 所定义的局域态。

(ii) $\hat{K}_{S_i}$ *is an isometry.*

证明。 **(i)** ˆ K_{S_i} 是参考文献 [46] 第 III 节中给出的克莱布什–戈尔丹变换的逆变换，适用于与自旋为 S_i的块耦合的轨道，但不包含其自旋和粒子数寄存器；其系数（参考文献 [46]的方程 12）与定义 4中的系数相同，其中块的自旋位于前面且不改变符号，因此得到所需结果。 **(ii)** 这显然成立，因为 M 寄存器的更新以及该变换中的旋转都是幺正算子。 □

3.4 完整制备电路

现在我们已经具备完整电路构造所需的两个工具：推论 1以步向量矩阵乘积态的形式加载约化张量，而引理 2将格点的一步返回到占据数基。本节将二者组装成完整的制备电路，并证明该电路能够制备相应的自旋适配矩阵乘积态量子态。

思路如下。对于每个 M，目标$|\Psi_{SM}\rangle$ 是一个普通的矩阵乘积态（定义 1），其位点张量是等距映射 $T_1, \ldots, T_d$ （方程 (24)），量子电路依次将这些张量作用于系统寄存器，而键指标$(\Gamma_i\alpha_i M_i)$由两个寄存器承载：$(\Gamma_i\alpha_i)$ 由键寄存器承载，M_i 由独立的 M 寄存器承载。每个 T_i 都可分解为一个约化张量 R_i 与一个克莱布施-戈丹系数$\mathcal{C}$ 的乘积（Wigner-Eckart 定理），这两个因子分别通过独立操作作用：步向量矩阵乘积态的位点等距映射提供约化张量的振幅，随后作用的逆克莱布什-戈尔丹变换则提供纯几何的克莱布施-戈丹系数。量子电路从左向右运行，每次分离出一个轨道，直至系统量子比特处于量子态 $|\Psi_{SM}\rangle$，而键 d上只剩下真空态，且与制备好的量子态不纠缠。

在图4中，我们展示了所得制备电路的一个格点。该量子电路作用于键寄存器、M 寄存器以及轨道的 $2d$ 量子比特。

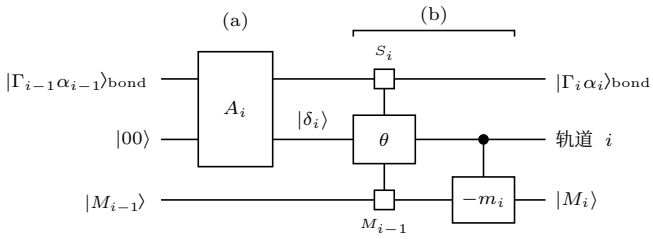


图4： **制备电路中的一个格点**。线路表示键寄存器（顶部）、代表轨道 i 的两个量子比特（中部）以及 M 寄存器（底部）。（a）步向量矩阵乘积态的格点等距映射 A_i（公式（39））将键寄存器从键 $i-1$ 推进至键 i，并使两个量子比特处于编码步 $|\delta_i\rangle$的叠加态。（b）逆克莱布什–戈尔丹变换将编码步 1 和2 旋转 θ 公式（47）所示的角度，该操作以从键寄存器中读取的自旋 S_i 和 M_{i-1} 寄存器的值 M 为控制，并随后从 m_i 寄存器中减去轨道 M 的投影。

初始时，键寄存器保存着目标扇区 $\Gamma_0 = (N,\ S)$ 中唯一的平凡多重态，M 寄存器保存着所需的投影 M，而量子比特处于 $|0\rangle$。对于 $i = 1,\ 2,\ \ldots\ldots,\ d$，量子电路随后按轨道依次执行：

1. 步向量矩阵乘积态在键寄存器和轨道 i的两个量子比特上的格点等距映射（39），其中 A_i^δ 为格点张量，步按照第 3.3 节所述方式编码；

ˆ 2. 对轨道 i 的两个量子比特和 M 寄存器执行逆克莱布什–戈尔丹变换 K_{S_i}，并以从键寄存器读出 S_i 的自旋为控制条件。

现在我们可以陈述本工作的主要结果：该制备电路能够制备任意投影 M对应的自旋适配矩阵乘积态，其成本为加载其逐步向量矩阵乘积态的成本（通常低于参考文献 [20]，因为该成本由 χ 而非 χ^*决定），此外每个格点还会产生少量额外开销，且该开销与张量的元素无关。该开销仅通过从键寄存器读出自旋而依赖于键维数；使用含有$\lceil\log_2(d+1)\rceil$ 个量子比特的自旋寄存器即可消除这项开销（第 3.5节）。

定理 1（自旋适配矩阵乘积态的制备）。设 $R_1,\ldots,R_d$为右规范自旋适配矩阵乘积态的约化张量（定义 5），其表示多重态 $|\Psi_{SM}\rangle$，$M=-S,\ldots,S$。则：

（***i***）对于每个 M，制备电路最终处于 $|\Gamma_d\rangle_{\text{bond}}|0\rangle_M\otimes|\Psi_{SM}\rangle$态，其中量子比特承载$|\Psi_{SM}\rangle$，采用第*2.1*节中的 *Jordan-Wigner* 编码，而辅助寄存器处于不依赖于 M的量子态。

（***ii***）量子电路的每个操作都是等距映射，因此可扩展为幺正算子。

(iii) 格点等距映射采用推论*1*中的映射，具有相同的块和相同的成本。在每个格点逆克莱布什-戈尔丹变换会在 (S_i, M_{i-1})的允许取值上进行多路复用的一次旋转、对 M 寄存器进行一次受控更新，并从键 S_i 寄存器中读出，同时完成反计算。这些操作均不依赖张量的元素；读出的成本取决于键寄存器的布局方式以及 χ_i（第 *3.5*节）。

证明所利用的事实是，量子比特承载轨道态和块态的乘积，且不含 Jordan-Wigner 字符串。它在链的每个切分处展开目标态，并通过归纳法表明，在格点 i之后，寄存器承载键 i处的展开，其中尚未制备的轨道的每个量子态都由其标签替代。随后，部分（ii）和（iii）由引理1和2 以及推论1得出。

证明。下文中，对于相邻键的扇区 Γ_{i-1} 和 Γ_i，δ（Γ_{i-1}，Γ_i）表示满足 $\Gamma_{i-1}=\Gamma_i+f(\delta)$ 的步，$q=(n,\ s)$是其局域多重态。当该步存在时，它是唯一的，因为四个增量$f(\delta)$各不相同。当没有步连接这两个扇区时，根据选择定则（22）每个块R_i^q（$\Gamma_{i-1}\Gamma_i$）都为零，该对也就从下文的求和中消失。首先介绍两个预备结果：

乘积的量子比特形式。根据第 2.4.1节，乘积 $|q,m\rangle\otimes|y\rangle$ 由轨道 i 的局域态和态 $|y\rangle$ 构成，后者对应轨道 $i+1,\ldots,d$，编码为它们的量子比特态的张量积，不含 Jordan-Wigner 字符串。以下每个乘积也都如此，因为其中的算符均按轨道索引递增的顺序排列。

在切分处展开目标态。我们首先将目标态写成量子电路经过格点 i 后所持有的形式：轨道 $1,\ldots,i$ 由向量 $|\omega^{(i)}\rangle$表示，并与轨道 $i+1,\ldots,d$的多重态纠缠；量子电路会将这些多重态保留在键寄存器和 M 寄存器中，直到到达相应轨道（第（i）部分）。对于 $i=0,\ldots,d$，我们递归地定义左侧轨道 $1,\ldots,i$ 上的向量$\left|\omega^{(i)}_{\Gamma_i\alpha_iM_i}\right\rangle$。对于$i=0$，不存在轨道，键上只有一个多重态，因此我们令 $\omega^{(0)}_{\Gamma_0 1 M_0}=\delta_{M_0M}$。对于 $i\geq 1$，

$$\left|\omega^{(i)}_{\Gamma_i\alpha_iM_i}\right\rangle=\sum_{\Gamma_{i-1},\alpha_{i-1}}\sum_m(R_i^q)_{(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}),(\Gamma_i\alpha_i)}\mathcal{C}^{S_{i-1}M_i+m}_{S_iM_i;sm}\times\left|\omega^{(i-1)}_{\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1},M_i+m}\right\rangle\otimes|q,m\rangle\,, \tag{49}$$

其中，q 为步骤 $\delta(\Gamma_{i-1},\ \Gamma_i)$ 的局域多重态。然后，对于每个 i,

$$|\Psi_{SM}\rangle=\sum_{\Gamma_i,\alpha_i,M_i}\left|\omega^{(i)}_{\Gamma_i\alpha_iM_i}\right\rangle\otimes|\Gamma_i\alpha_i;M_i\rangle\,. \tag{50}$$

对于 $i=0$，这是 $|\Psi_{SM}\rangle=|\Gamma_0,\ 1;\ M\rangle$，递推的终点（27）。若其对 $i-1$成立，则对每个右块态，用方程（27）和（26进行代换$\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}$；$M_{i-1}\rangle$。根据选择定则（22），对于给定的Γ_{i-1} 和 Γ_i，唯一有贡献的局域多重态是步 $\delta(\Gamma_{i-1},\ \Gamma_i)$。将 $M_{i-1}-m$

由于 M_i， $|\Gamma_i\alpha_i;\ M_i\rangle$ 的系数就是方程（49）的右端，这给出了 i的表述。在 $i=d$ 处，右块为空，唯一的项是真空态，其 $M_d=0$，而方程（50）写为 $|\Psi_{SM}\rangle = \left|\omega^{(d)}_{\Gamma_d 10}\right\rangle$。

第（i）部分：每个格点之后的量子态。格点 i之后，寄存器保存目标态在键 i处的展开式（50），其中每个右块态 $|\Gamma_i\alpha_i;\ M_i\rangle$，尚未到达的轨道量子态由其标签代替：$(\Gamma_i\alpha_i)$ 位于键寄存器中， M_i 位于 M 寄存器中。也就是说，经过格点1、……、i 上的操作后，寄存器保存

$$\sum_{\Gamma_i,\alpha_i,M_i} |\Gamma_i\alpha_i\rangle_{\text{bond}}\,|M_i\rangle_M\,\left|\omega^{(i)}_{\Gamma_i\alpha_i M_i}\right\rangle_{1\ldots i}|0\rangle_{i+1\ldots d}\,. \tag{51}$$

我们对 i 使用归纳法证明这一点。对于 $i=0$，它就是初始态，因为 $\omega^{(0)}_{\Gamma_0 1 M_0}=\delta_{M_0 M}$。假设对于 $i-1$ 命题成立，并跟踪一个标签为 $(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1})$ 和M_{i-1}的项，经过格点 i上的两个操作。

位点等距映射写入这一步，约化张量的各元素作为振幅。根据方程（39）和（33），它将 $|\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}\rangle_{\text{bond}}|00\rangle$ 映射为

$$\sum_{\Gamma_i,\alpha_i}(R_i^q)_{(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}),(\Gamma_i\alpha_i)}\,|\Gamma_i\alpha_i\rangle_{\text{bond}}\,|\delta\rangle\,,$$

其中 $\delta=\delta(\Gamma_{i-1},\ \Gamma_i)$，其局域多重态为 q。

逆克莱布什-戈尔丹变换 将该步变为轨道的量子态，并从 M 寄存器中减去该量子态的投影 m。它ˆ施加K_{S_i}，其中 S_i 从键寄存器中读取；根据引理2(i)，这会将 $|\delta\rangle\,|M_{i-1}\rangle_M$ 映射为

$$\sum_m \mathcal{C}^{S_{i-1}M_{i-1}}_{S_i M_{i-1}-m;\,sm}\,|q,m\rangle\,|M_{i-1}-m\rangle_M\,.$$

引理中的自旋 $S_i+\Delta S(\delta)$ 是扇区 Γ_{i-1} 的自旋 S_{i-1}，因为 $\delta=\delta(\Gamma_{i-1},\ \Gamma_i)$。

引理要求 $M_{i-1}\in\{-S_{i-1},\ldots,\ S_{i-1}\}$，且每个非零项都满足这一条件。首先，在每条键 j， $\omega^{(j)}_{\Gamma_j\alpha_j M_j}$ 上，当 $|M_j|>S_j$ 时，结果为零： $\omega^{(0)}$ 仅在 $M_0=M$ 时非零，其中 $|M|\le S$；并且对于递推式（49）中的每个克莱布施-戈丹系数，此时都为零。其次， $S_{i-1}-M_{i-1}$ 是整数，因为$S-M$ 是整数，而且每个格点使自旋与投影发生变化的量之差为整数。

对各项求和并将 $M_{i-1}-m$ 重命名为 M_i 后，$|\Gamma_i\alpha_i\rangle_{\text{bond}}\,|M_i\rangle_M$ 的系数就是方程（49）右侧在上述量子比特形式下、由轨道 $1,\ldots,i$ 的量子比特承载的结果。这就是针对 i 的方程（51）。在 $i=d$ 处，唯一的扇区是真空态，且有 $S_d=0$，因此只有 $M_d=0$ 的项非零：键寄存器持有 $|\Gamma_d\rangle_{\text{bond}}$， M 寄存器持有 0，而量子比特持有 $\left|\omega^{(d)}_{\Gamma_d 10}\right\rangle$；根据方程（50），在 $i=d$ 处这就是 $|\Psi_{SM}\rangle$。由于目标态在键 i 处的展开式（50）与量子电路经过格点 i 后的量子态遵循相同的递推关系（49），因此量子电路最终得到目标态。

第（ii）部分：等距映射。量子电路可以由酉算子构成，因为其中的两个操作都是等距映射。

位点等距映射 根据构造会保留内积，因为步向量矩阵乘积态是右规范的。根据方程（39），它将两个基态$|\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1}\rangle_{\text{bond}}\,|00\rangle$ 和 $|\Gamma'_{i-1}\alpha'_{i-1}\rangle_{\text{键}}\,|00\rangle$ 映射为正交归一态 $|\Gamma_i\alpha_i\rangle_{\text{bond}}\,|\delta\rangle$的线性组合，其中 A_i^δ的各元素作为系数。两个映像的内积因此就是 $\sum_\delta A_i^\delta\,(A_i^\delta)^\dagger$中 $(\Gamma_{i-1}\alpha_{i-1})$ 与 $(\Gamma'_{i-1}\alpha'_{i-1})$ 之间的元素。自旋适配的矩阵乘积态是右规范的，因此根据引理 1（iii），该矩阵是恒等变换。

逆克莱布什-戈尔丹变换 会保留ˆ内积，因为对于每个自旋 K_{S_i}， S_i都如此。它ˆ保持键寄存器不变，并对其中保存的 K_{S_i} 的每个取值应用 S_i。根据引理 2 （ii），ˆ K_{S_i} 是该引理定义域上的等距映射；根据第（i）部分，量子电路所到达的态属于该定义域。键寄存器中具有不同 S_i 的态彼此正交，并且由于寄存器保持不变，它们仍然保持正交。

（iii）部分：成本。量子电路的成本包括推论 1 中格点等距映射的成本，以及每个格点上逆克莱布什-戈尔丹变换的成本；后者不依赖于张量的元素。

格点等距映射 是步向量矩阵乘积态的映射（39），其中步编码在轨道 i的两个量子比特上，因此推论1 适用于该映射。

根据方程（45）和（46），逆克莱布什-戈尔丹变换是对编码步1 和 2 施加角度为（47）的旋转，并在 S_i 和M_{i-1}上进行多路复用，随后更新 M 寄存器；该更新由轨道 i的两个量子比特控制。角度不涉及张量。控制量 S_i 是键指标所属扇区的自旋，仅由指标决定，因此可在旋转前计算到辅助量子比特中，并在旋转后反计算。该读出操作的成本取决于键寄存器的布局以及 χ_i，但不取决于张量的元素。

□

我们提出两点说明。首先，除了固定$|\Psi_{SM}\rangle$的 M量子态外，通过相应地初始化 M，量子电路还可以制备具有不同M 值的任意叠加态。定理1 的第（i）部分对每个 M都是量子态等式，且辅助寄存器最终均处于相同的量子态 $|\Gamma_d\rangle_{\text{bond}}\,|0\rangle_M$。根据线性性，如果量子电路以 M寄存器处于叠加态 M的状态进行初始化 $\sum_M\beta_M\,|M\rangle$，则会制备

$$|\Gamma_d\rangle_{\text{bond}}\otimes|0\rangle_M\otimes\sum_{M=-S}^{S}\beta_M\,|\Psi_{SM}\rangle\,, \tag{52}$$

它是多重态的任意量子态。其次，虽然我们建议交错应用格点等距映射和逆克莱布希-戈登变换，但也可以单独应用方程 44的下排，并在根据推论 1制备完整的步向量矩阵乘积态之后，按顺序依次执行。此时，自旋将

保存在一个独立的寄存器中，该寄存器从 S 开始，并在每个格点根据这一步进行更新；所有格点的逆克莱布希-戈登变换合起来构成参考文献 [46],中的逆量子 Paldus 变换，但不包含其粒子数寄存器，且由于我们采用从右到左的自旋融合约定，其量子比特顺序反转。对于每个 M，这个两阶段量子电路都会制备相同的量子态。定理 1 中的量子电路交错执行这两个阶段，因此可以从键寄存器读取 S_i ，无需自旋寄存器；第 3.5 节比较了这两种方案的成本，二者差异并不显著。

3.5 成本

根据推论 1，格点等距映射继承了参考文献 [20], 中块稀疏制备的成本，不同之处在于，此处针对的是大小为 $h_\Gamma^{(i)} \times n_\Gamma^{(i-1)}$ 的位点矩阵块，即按多重态而非右块的态计数的大小。在单个投影 M 下，从非自旋适配形式制备相同的量子态，则涉及按态计数的块。对于单重态，非自旋适配矩阵乘积态的键 i 携带 $\chi_i^* = \sum_\Gamma n_\Gamma^{(i)}\,(2S_\Gamma + 1)$ 个态，而自旋适配矩阵乘积态携带 $\chi_i = \sum_\Gamma n_\Gamma^{(i)}$ 个多重态（推论 1(ii)）。这种差异正是我们方法的优势；我们将在第 4 节通过具体示例对其进行量化。

逆克莱布施-戈丹变换带来的成本可以忽略不计，且与张量的元素无关（定理 1(iii)）。格点i 处的旋转最多在 1 2$(k+1)(k+2)$ 对 (S_i, M_{i-1}) 上进行多路复用，其中 $k = d + 1 - i$ [46]；而 M 寄存器包含 $n_M = \lceil \log_2(2d+1) \rceil$ 个量子比特，因此旋转和 M 的更新仅取决于轨道数。只有 S_i 的读出取决于键维数。如果键寄存器显式存储扇区，则读出不产生额外成本；否则，需要对键指标的 χ_i 个值进行查表。第 3.4 节的两阶段线路以包含 $n_S = \lceil \log_2(d+1) \rceil$ 个量子比特的自旋寄存器取代读出，并在每个格点更新该寄存器，需使用 $6(n_S+1)$ 个托佛利门 [46]。在第 4 节的示例中，这些变换（包括读出）所占的托佛利门不到 0.2%，两种线路之间的差异更小，因此二者的选择基本无关紧要。

4 数值实验

态制备电路的成本经由其自旋适配键维数而取决于该量子态 χ，以多重态计数并按对称性扇区分辨（推论 1），而这只有在完成一次密度矩阵重整化群计算之后才能得知。因此，我们估计两个常用基准系统的初始态所对应量子电路的成本，并将其与稠密[19]和块稀疏 [20] 制备例程进行比较，这些例程作用于相同的态。

我们的示例是铁硫簇完全集活性空间（CAS）模型的单重态基态，即 $[Fe_2S_2]^{2-}$ 的 CAS(30e,20o) 模型，以及 $[Fe_4S_4]^{2-}$ 的 CAS(54e,36o) 模型。铁硫簇的强关联特性使其成为量子计算机上量子化学研究的标准目标，尤其是固氮酶的铁钼辅因子 [7–9, 15, 21, 67, 84, 85], ；这两个簇也常用作初始态制备的基准 [14, 15, 17–20]。

4.1 量子态生成与成本模型

为便于直接比较，我们从参考文献 [20], 的数据记录中获取两个模型的积分；该记录本身与参考文献 [14, 15, 67, 84]中的数据有关。对于每个模型，我们都运行了自旋适配 DMRG 计算，使用 `block2` [69]，键维数为 $\chi = 1000$个多重态，并遵循随参考文献 [20]一同发布的脚本；DMRG 计算的完整细节见附录 A.2。我们使用随参考文献 [20],一同发布的代码统计托佛利门和量子比特数量，该代码本身基于 `Qualtran` [86]构建。比较中的各项方案均按发表时的设定计算成本，因此稠密基线不包含参考文献 [20], 中引入的实张量节省，但 U(1) U(1)适配基线包含此节省。我们假设旋转角为 15 位，相较于 DMRG 截断误差而言，这是相当宽裕的分配。代码会估算三种方法的格点等距映射成本，但不估算克莱布施-戈丹变换（仅在我们的工作中使用）的成本，因此我们构建了 `Qualtran` ，用于实现定理中的逆变换；这些 bloqs 由标准查找、旋转和加法 bloqs 组成（即每个格点都要根据键指标查找 S_i 、查找由 S_i 和 M_{i-1}寻址的旋转角，执行旋转，并向 M 寄存器进行两次受控加法）。角度查找仅涵盖键上出现的自旋。每次查表都采用 QROAM，因此可以在托佛利门与辅助量子比特之间进行权衡 [8, 87]。在我们的所有统计中，无论是基线还是我们的量子电路，每次查找都设为使托佛利门数量最少，且不限制辅助量子比特数量。参考文献 [20] 则手动限制了某些查找所用的辅助量子比特，因此我们两项工作报告的辅助量子比特数量略有差异。

4.2 比较

现有用于容错 MPS 制备的领先方法，均以非自旋适配形式加载量子态，采用稠密表示 [19] （稠密制备）或块稀疏表示 [20] （U(1) ×U(1) 制备）。为进行公平比较，我们从两种角度将我们的协议与这两种方法进行比较：对于相同的量子态进行比较，以及在截断后具有相同保真度的情况下进行比较。

对于相同量子态的比较，我们将每个自旋适配矩阵乘积态转换为其非自旋适配形式

（公式（24）），取在 $M = 0$，并使用上述成本模型计算制备这两种形式的成本。非自旋适配形式有时可以截断为更小的键维数，而保真度损失很小 [20]，截断态的制备成本也相应更低，因此我们还在保真度相等的条件下进行比较。我们将每个量子态的两种形式都截断到一系列键维度：自旋适配形式以多重态计数（χ），非自旋适配形式以态计数（χ^*）；在每条键处，保留所有扇区中最大的施密特值。对于自旋适配形式，施密特值对应完整的多重态：一个自旋为 S_Γ、施密特值为 λ 的多重态在量子态中携带权重 λ^2，而在非自旋适配形式中表现为 $2S_\Gamma + 1$ 个施密特值各为 $\lambda/\sqrt{2S_\Gamma + 1}$ 的态（见推论 1(ii) 的证明）。随后，对于每个截断态 $\tilde{\Psi}$，我们计算其制备成本及其相对于未截断态 $|\Psi$ 的截断不保真度 $1 - |\Psi|\tilde{\Psi}|^2$。需要指出的是，如果使用适配于 U(1) × U(1) 对称性的 DMRG，在阿贝尔情形下可能会得到不同的结果，因为这允许量子态不是总自旋的本征态；我们将自旋适配态与其非自旋适配展开进行比较的方式，与文献 Ref. [20] 中的做法一致。

4.3 结果与讨论

现在，我们将第 4.1 节的成本模型应用于两个铁硫簇，并依次进行第 4.2 节中的两项比较。表 2比较了同一未截断态的三种制备方式，图5则比较了将各形式的态截断至给定保真度时的结果。随后我们将展示，逆克莱布什–戈尔丹变换对这些成本的贡献微乎其微，并追溯节省来自键上多重态的自旋。

对于未截断态，自旋适配制备所需的托佛利门最多比 U(1) ×U(1) 制备少 4.9×，且最多比稠密制备少 135× [20], [19]。具体而言（表 2），与 U(1) × U(1) 制备相比，$[Fe_2S_2]^{2-}$ 的成本节省了 3.4 倍，$[Fe_4S_4]^{2-}$则节省了 4.9 倍；与稠密制备相比，节省倍数分别为 51 和 135。自旋适配制备所需的辅助量子比特也更少：对于 $[Fe_2S_2]^{2-}$，约为另外两种制备方式的一半；对于 $[Fe_4S_4]^{2-}$，约为四分之一。这些节省反映了表 2 中的键维数：两种非自旋适配形式的制备都会加载张量，其键最多可容纳

$\chi^* = 3299$ 和 $\chi^* = 7251$态，而自旋适配矩阵乘积态的键最多容纳 $\chi = 1000$ 个多重态。

然而，如果在相同的保真度损失下，非自旋适配形式能够比自旋适配形式截断得多得多，那么仅比较未截断态就会夸大我们的优势（第 4.2 节），文献 [20] 提出了这种可能性。图 5

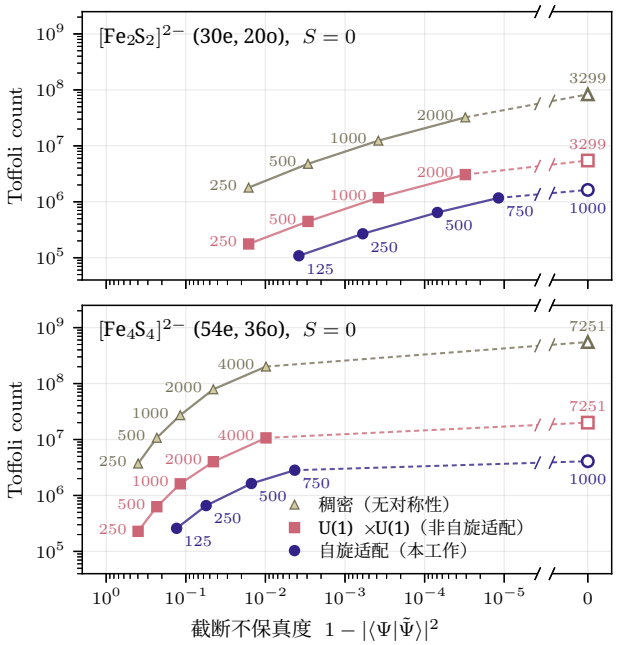


图 5：**比较不同截断保真度下的托佛利门成本。** 将本工作中的自旋适配制备（蓝色圆圈）与 U(1) × U(1) 制备 [20]（红色方块）以及非自旋适配形式的稠密制备（金色三角形）[19]进行比较。每个数据点表示截断至其旁标注的键维数的态；自旋适配情形以多重态（χ）表示，非自旋适配情形则以态（χ^*）表示。空心符号表示未截断的态（即截断不保真度为零）。

表明，对于两个团簇，与 U(1) × U(1) 制备相比，情况并非如此：在保真度相同时，节省至少与未截断态时一样大。在截断不保真度相同时，对于 $[Fe_2S_2]^{2-}$，自旋适配制备所需的托佛利门比 U(1) ×U(1) 制备少 3.5–3.6× ；对于 $[Fe_4S_4]^{2-}$，则少 5.0–5.4×。与稠密制备相比，$[Fe_2S_2]^{2-}$ 的相应改进倍数为 37 至 38，$[Fe_4S_4]^{2-}$ 的相应改进倍数为 91 至 95。这些比值取自 $\chi = 125$ 的自旋适配态，分别为 250 和 500；非自旋适配序列的各点之间采用对数空间线性插值，因此这些比值只是近似值。相同的数据也可以按相同成本来解读：在托佛利门数量相同的情况下，自旋适配制备能够达到更高的保真度，从而提高量子相位估计的成功概率，并减少所需的重复次数。

逆克莱布什-戈尔丹变换是我们量子电路中另外两种制备方法不需要的唯一部分，与加载约化张量振幅本身相比，其成本可以忽略不计。对于未截断的量子态，它们所占的 Toffoli 门数量不到 0.2%（表 2），并且最多需要 74 和 91 个辅助量子比特，远低于格点等距映射的峰值成本。其成本也几乎与键维数无关：在 $\chi = 125$ 和 $\chi = 1000$ 之间，它仅增长了 27%，而

表 2: **使用三种方法制备每个量子态的托佛利门成本**（括号内为辅助量子比特数量）：‘稠密’表示如参考文献 [19] 中发表的无对称性的非自旋适配形式的制备；‘U(1) ×U(1)’表示利用阿贝尔分块稀疏性制备非自旋适配形式 [20]；‘本工作’表示根据定理 1，使用我们的协议制备自旋适配形式。

系统	χ	χ^*	稠密 [19]	U(1) × U(1) [20]	本工作		相对于本工作的比值	
					总计	克莱布什–戈尔丹	稠密	U(1) ×U(1)
$[Fe_2S_2]^{2-}$	1000	3299	8.32×10^7 (516)	5.46×10^6 (514)	1.63×10^6 (267)	2.56×10^3	51	3.4
$[Fe_4S_4]^{2-}$	1000	7251	5.52×10^8 (997)	2.00×10^7 (996)	4.09×10^6 (268)	6.36×10^3	135	4.9

格点等距映射的成本增长约十五倍，因此随着键维数增加，它们所占的比例似乎会下降。因此，我们量子电路的成本绝大部分由其格点等距映射主导；在当前容错酉综合所允许的范围内，它已经几乎达到了参数最优。

托佛利门数节省的大小取决于键上多重态的自旋，因此对于 $[Fe_4S_4]^{2-}$ ，节省幅度大于 $[Fe_2S_2]^{2-}$。对于单重态，键上自旋为 S_Γ 的自旋适配矩阵乘积态多重态，对应于非自旋适配形式中同一键上的 $2S_\Gamma + 1$ 个态（第3.5节），这些态均分其权重（第4.2节）。因此，截断非自旋适配形式时，每保留一个多重态就需要 $2S_\Gamma + 1$ 个态，并且会优先舍弃自旋较高的多重态。施密特权重中由高自旋多重态承载的部分越大，自旋适配带来的节省就越多。

在这两个簇中，尽管总自旋为零，这些自旋都很大：在中间键处，对于 $[Fe_4S_4]^{2-}$， λ^2 的权重中有 83% 位于自旋为 2 的多重态中， $5/2$ ；对于$[Fe_2S_2]^{2-}$，有 80% 位于自旋为 4 的多重态中，$9/2$ 。因此，这两个簇都是适合进行自旋适配的情况，因为它们的键上都具有较大的自旋。对于总自旋为$S > 0$ 的多重态目标态，比较结果还取决于非自旋适配形式所采用的投影 M，以及键是由左块还是右块描述。该量子电路仍需在更广泛的分子、活性空间、自旋态和键维数范围内应用。

5 结论

本工作表明，以与其经典描述相当的成本制备自旋适配矩阵乘积态的障碍，主要在于标记方式。在占据数基中，总自旋不会从一个轨道简单地累加到下一个轨道；但只要根据酉群方法的步为每个格点添加标记，约化张量便构成一种阿贝尔对称矩阵乘积态，参考文献 [20] 中的分块稀疏协议无需修改即可加载该态。非阿贝尔对称性随后只需通过一次固定的基变换即可实现，即量子 Paldus 变换 [46], 的逆变换，其成本可以忽略不计。自旋适配带来的压缩效果由此也延续到了量子电路中。节省的资源取决于键上多重态的自旋，因此即使目标态的总自旋为零，节省也可能很显著：我们的两个示例都是单重态。

我们的量子电路成本与经典计算所存储的参数数量之间仍存在差距，这源于综合，而非对称性。正如 Rupprecht 和 Wölk 所指出的， [20]，将每个矩形块补全为幺正算子，会载入参数计数表明并不需要的旋转角度；直接将这些块综合为等距映射，就能消除这部分开销，无论是对他们的制备还是我们的制备都是如此。我们可以很容易地将哈密顿量的阿贝尔点群对称性纳入协议，只需为块添加一个标签（第3.2节）。

最后，我们注意到，我们的构造中几乎没有内容是SU(2)特有的。它依赖于这样一个事实：两个自旋耦合时，每个总自旋至多出现一次，因此约化张量的每个块都恰好属于一个步骤。因此，我们预计，同样的两个阶段也适用于适配其他非阿贝尔对称性的矩阵乘积态：先按步骤进行块稀疏加载，再如量子舒尔变换中那样，执行与量子态无关的一系列克莱布什–戈尔丹变换 [88]。这些步骤以及用于撤销它们的变换，取决于相关群的表示论。当然，这并非自动实现，因为对于SU(3) 等更大的群，同一个对称性标签在一次耦合中可能出现多次，因此步骤还必须记录具体是哪一次。

相关工作

在本手稿最后定稿期间，我们得知几天前发布了一篇独立的预印本 [89] ，其中介绍了一种基于相似原理的量子态制备协议（即直接从自旋适配矩阵乘积态的约化张量制备该量子态）。我们建议感兴趣的读者参阅这两项工作，以全面了解相关内容。

致谢

我们感谢 Tom Bromley 和 Annina Lieberherr 提供的宝贵讨论。本研究得到了墨尔本大学研究计算服务和 Petascale Campus Initiative 的支撑。本工作是 QUICHE 项目（量子集成化学，参考编号：10150101）的一部分，该项目由 Innovate UK 资助。

人工智能使用声明

在整个项目过程中，我们在密切监督下使用了生成式人工智能工具（Claude Opus 4.8、5 和 5.5, Claude Fable 5、5.1 和 5.2），协助完成以下工作：对草稿提出建议和反馈、排版方程、数学陈述和图表、探索理论推导，以及为数值实验编写代码。作者逐行严格审查了这些工具生成的所有影响最终稿件的内容，并对其内容和准确性承担全部责任。

参考文献

[1] A Yu Kitaev. “量子测量与阿贝尔稳定子问题” (1995).[2] Daniel S Abrams and Seth Lloyd. “提供指数级加速以求解本征值和特征向量的量子算法”。PhysicalReview Letters **83**, 5162(1999).[3] Alán Aspuru-Guzik, Anthony D. Dutoi, Peter J. Love, and Martin Head-Gordon. “分子能量的模拟量子计算”。《科学》**309**, 1704–1707 (2005).[4] Nick S Blunt, Joan Camps, Ophelia Crawford, Róbert Izsák, Sebastian Leontica, Arjun Mirani, Alexandra E Moylett, Sam A Scivier, Christoph Sunderhauf, Patrick Schopf, et al. “用于药物发现的量子计算现状展望”。《化学理论与计算杂志》**18**, 7001–7023 (2022).[5]Joshua J Goings, Alec White, Joonho Lee, Christofer S Tautermann, Matthias Degroote, Craig Gidney, Toru Shiozaki, Ryan Babbush, and Nicholas C Rubin. “在当今的经典计算机和未来的量子计算机上可靠地评估细胞色素 P450 的电子结构”。《美国国家科学院院刊》**119**, e2203533119 (2022).[6]Raffaele Santagati, Alan Aspuru-Guzik, Ryan Babbush, Matthias Degroote, Leticia González, Elica Kyoseva, Nikolaj Moll, Markus Oppel, Robert M Parrish, Nicholas C Rubin, et al. “利用量子计算机进行药物设计”。NaturePhysics**20**, 549–557(2024).

[7] Markus Reiher、Nathan Wiebe、Krysta M Svore、Dave Wecker 和 Matthias Troyer。《在量子计算机上阐明反应机制》。美国国家科学院院刊 114，7555–7560（2017）。[8] Dominic W Berry、Craig Gidney、Mario Motta、Jarrod R McClean 和 Ryan Babbush。《利用稀疏性和低秩分解对任意基组量子化学进行量子比特化》。Quantum 3，208（2019）。[9]Joonho Lee、Dominic W Berry、Craig Gidney、William J Huggins、Jarrod R McClean、Nathan Wiebe 和 Ryan Babbush。《通过张量超收缩进一步提高量子化学计算的效率》。PRX Quantum 2，030305（2021）。[10] Vera von Burg、Guang Hao Low、Thomas Häner、Damian S Steiger、Markus Reiher、Martin Roetteler 和 Matthias Troyer。《量子计算增强计算催化》。Physical Review Research 3，033055（2021）。[11] Julia E Rice、Tanvi P Gujarati、Mario Motta、Tyler Y Takeshita、Eunseok Lee、Joseph A Latone 和 Jeannette M Garcia。《锂硫电池主要产物的量子计算》。The Journal of Chemical Physics154（2021）。[12] Isaac H Kim、Ye-Hua Liu、Sam Pallister、William Pol、Sam Roberts 和 Eunseok Lee。《量子化学模拟的容错资源估算：锂离子电池电解质分子案例研究》。Physical Review Research 4，023019（2022）。[13]Alain Delgado、Pablo AM Casares、Roberto Dos Reis、Modjtaba Shokrian Zini、Roberto Campos、Norge Cruz-Hernández、Arne-Christian Voigt、Angus Lowe、Soran Jahangiri、Miguel Angel Martin-Delgado 等。《利用容错量子计算机模拟锂离子电池的关键性质》。Physical Review A 106，032428（2022）。[14] Pauline J Ollitrault、Cristian L Cortes、Jérôme F Gonthier、Robert M Parrish、Dario Rocca、Gian-Luca Anselmetti、Matthias Degroote、Nikolaj Moll、Raffaele Santagati 和 Michael Streif。《通过轨道优化提升初始态重叠，加速分子电子基态能量估算》。Physical Review Letters133（2024）。[15]Seunghoon Lee、Joonho Lee、Huanchen Zhai、Yu Tong、Alexander M Dalzell、Ashutosh Ku mar、Phillip Helms、Johnnie Gray、Zhi-Hao Cui、Wenyuan Liu 等。《评估基态量子化学中指数级量子优势的证据》。Nature communications 14，1952（2023）。[16]Norm M Tubman、Carlos Mejuto-Zaera、Jef- frey M Epstein、Diptarka Hait、Daniel S Levine,

William Huggins、Zhang Jiang、Jarrod R Mc- Clean、Ryan Babbush、Martin Head-Gordon 等。《推迟正交灾难：在量子设备上高效制备用于电子结构模拟的量子态》（2018）。网址： https://arxiv.org/abs/1809.05523。[17] Daniel Marti-Dafcik、Hugh GA Burton 和 David P Tew。《自旋耦合就是你所需要的一切：在量子计算机上编码分子中的强电子关联》。Physical Review Research7（2025）。[18] Stepan Fomichev、Kasra Hejazi、Mod- jtaba Shokrian Zini、Matthew Kiser、Joana Fraxanet、Pablo Antonio Moreno Casares、Alain Delgado、Joonsuk Huh、Arne-Christian Voigt、Jonathan E Mueller 等。《量子计算机上的量子化学初态制备》。PRX Quantum 5，040339（2024）。[19]Dominic W Berry、Yu Tong、Tanuj Khattar、Alec White、Tae In Kim、Guang Hao Low、Ser- gio Boixo、Zhiyan Ding、Lin Lin、Seunghoon Lee 等。《快速制备初态以实现强关联分子的量子模拟》。PRX quantum 6，020327（2025）。[20]Felix Rupprecht 和 Sabine Wölk。《利用对称性诱导的块稀疏性加速矩阵乘积态制备》（2026）。网址： https://arxiv.org/abs/2605.28489。[21] Guang Hao Low、Robbie King、Dominic W Berry、Qiushi Han、A Eugene DePrince III、Alec F White、Ryan Babbush、Rolando D Somma 和 Nicholas C Rubin。《通过谱放大快速量子模拟电子结构》。Physical Review X 15，041016（2025）。[22]Emanuel Knill。《量子线路近似》（1995）。网址： https://arxiv.org/abs/quant-ph/9508006。[23]Mikko Mottonen、Juha J Vartiainen、Ville Bergholm 和 Martti M Salomaa。《利用均匀受控旋转变换量子态》（2004）。网址： https://arxiv.org/abs/quant-ph/0407010。[24]V.V. Shende、S.S. Bullock 和 I.L. Markov。《量子逻辑电路综合》。IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems 25，1000–1010（2006）。[25] Matthew L Sims-Goh、Lukasz Cincio、Annina Z Lieberherr、Mekena McGrew 和 Thomas R Bromley。《利用优化张量网络进行多变量量子态制备》（2026）。网址： https://arxiv.org/abs/2609.09304。[26] Adam Holmes 和 Anne Y Matsuura。《用于精确制备光滑可微函数的高效量子电路》。载于 2020 年 IEEE 国际量子计算会议，计算与工程（QCE）。第 169–179 页。IEEE（2020）。[27] Javier Gonzalez-Conde、Thomas W Watts、Pablo Rodriguez-Grasa 和 Mikel Sanz。《多项式函数的高效量子振幅编码》。Quantum 8, 1297（2024）。[28] Jason Iaconis、Sonika Johri 和 Elton Yechao Zhu。《使用矩阵乘积态制备正态分布的量子态》。npj Quantum Information 10, 15（2024）。[29] Vladyslav Bohun、Illia Lukin、Mykola Luhanko、Georgios Korpas、Philippe JS De Brouwer、Mykola Maksymenko 和 Maciej Koch-Janusz。《光滑函数的矩阵乘积态表示中的纠缠标度及其浅层量子电路近似》。Physical Review Research 8（2026）。[30]Floyd M Creevey、Hitham T Hassan、James McCafferty、Lloyd CL Hollenberg 和 Sergii Strelchuk。《使用矩阵乘积态编码基因组数据的可扩展量子态制备》（2025）。网址： https://arxiv.org/abs/2508.06184。[31] Fredrik Hasselgren 和 Matthew L Sims-Goh。《打破链式结构：使用 aspire 进行几何原生态制备》（2026）。网址： https://arxiv.org/abs/2610.03528。[32] Shi-Ju Ran。《将矩阵乘积态编码为由单量子比特门和双量子比特门组成的量子电路》。Physical Review A 101（2020）。[33] William J Huggins、Oskar Leimkuhler、Torin F Stetina 和 K Birgitta Whaley。《第一量子化中分子量子模拟的高效态制备》。PRX Quantum 6, 020319（2025）。[34]C. Schön、E. Solano、F. Verstraete、J. I. Cirac 和 M. M. Wolf。《纠缠多量子比特态的序贯生成》。Phys. Rev. Lett. 95（2005）。[35] Lov Grover 和 Terry Rudolph。《创建与可高效积分概率分布相对应的叠加态》（2002）。[36] Arthur G Rattew 和 Bálint Koczor。《以对数复杂度在量子寄存器中制备任意连续函数》（2022）。网址： https://arxiv.org/abs/2205.00519。[37] Sam McArdle、András Gilyén 和 Mario Berta。《无需相干算术的量子态制备》（2022）。网址： https://arxiv.org/abs/2210.14892。[38] Mudassir Moosa、Thomas W Watts、Yiyou Chen、Abhijat Sarma 和 Peter L McMahon。《用于加载任意函数傅里叶近似的线性深度量子电路》。Quantum Science and Technology 9, 015002（2023）。[39] Gabriel Marin-Sanchez、Javier Gonzalez-Conde 和 Mikel Sanz。《用于近似函数加载的量子算法》。

函数加载》。Physical Review Research 5, 033114（2023）。[40] Hitomi Mori、Kosuke Mitarai 和 Keisuke Fujii。《多变量蒙特卡罗模拟的高效态制备》（2024）。网址：https://arxiv.org/abs/2409.07336。[41]Matthias Rosenkranz、Eric Brunner、Gabriel Marin-Sanchez、Nathan Fitzpatrick、Silas Dilkes、Yao Tang、Yuta Kikuchi 和 Marcello Benedetti。《多变量函数的量子态制备》。Quantum 9, 1703（2025）。网址：https://quantum-journal.org/papers/q-2025-04-09-1703/。[42]Ian D Kivlichan、Jarrod McClean、Nathan Wiebe、Craig Gidney、Alán Aspuru-Guzik、Garnet Kin-Lic Chan 和 Ryan Babbush。《具有线性深度和连通性的电子结构量子模拟》。Physical Review Letters 120, 110501（2018）。[43] Matthew L Goh、Martin Larocca、Lukasz Cincio、Marco Cerezo 和 Frédéric Sauvage。《量子计算的李代数经典模拟》。Physical Review Research 7（2025）。[44]Adelina Bärligea、Matthew L Sims-Goh 和 Jakob S Kottmann。《推动李代数经典模拟超越自由费米子》（2026）。网址：https://arxiv.org/abs/2604.16701。[45]Felix Rupprecht 和 Sabine Wölk。《改进容错成本的稀疏量子态制备》（2026）。网址：https://arxiv.org/abs/2601.09388。[46]Jędrzej Burkat 和 Nathan Fitzpatrick。《量子 Paldus 变换：高效电路及其应用》（2025）。网址：https://arxiv.org/abs/2506.09151。[47] Scott Aaronson。《细读细则》。Nature Physics 11, 291–293（2015）。[48]Alexander M. Dalzell、Sam McArdle、Mario Berta、Przemyslaw Bienias、Chi-Fang Chen、András Gilyén、Connor T. Hann、Michael J. Kastoryano、Emil T. Khabiboulline、Aleksander Kubica、Grant Salton、Samson Wang 和 Fernando G. S. L. Brandão。《量子算法：应用与端到端复杂度综述》。剑桥大学出版社（2025）。[49]Guifré Vidal。《对轻度纠缠量子计算的高效经典模拟》。Physical Review Letters 91, 147902（2003）。[50]Guifré Vidal。《一维量子多体系统的高效模拟》。Physical Review Letters 93, 040502（2004）。[51] Jutho Haegeman、J Ignacio Cirac、Tobias J Osborne、Iztok Pižorn、Henri Verschelde 和 Frank Verstraete。《量子晶格的含时变分原理》。Physical Review Letters 107, 070601（2011）。[52] Jutho Haegeman、Christian Lubich、Ivan Oseledets、Bart Vandereycken 和 Frank Verstraete。“使用矩阵乘积态统一时间演化与优化”。Physical Re- view B 94, 165116 (2016)。[53] Sebastian Paeckel、Thomas Köhler、Andreas Swoboda、Salvatore R Manmana、Ulrich Scholl- wöck 和 Claudius Hubig。“矩阵乘积态的时间演化方法”。Annals of Physics 411, 167998 (2019)。[54] Steven R White。“量子重整化群的密度矩阵表述”。Physical review letters 69, 2863 (1992)。[55] Steven R White。“量子重整化群的密度矩阵算法”。Physical re- view b48 (1993)。[56] Ulrich Schollwöck。“密度矩阵重整化群”。Reviews of modern physics 77, 259–315 (2005)。[57] Ulrich Schollwöck。“矩阵乘积态时代的密度矩阵重整化群”。Annals of physics 326, 96–192 (2011)。[58] Ian P McCulloch。“从密度矩阵重整化群到矩阵乘积态”。Jour- nal of Statistical Mechanics: Theory and Exper- iment 2007, P10014 (2007)。[59]Andreas Weichselbaum。“张量网络中的非阿贝尔对称性：量子对称空间方法”。Annals of Physics 327, 2972– 3047 (2012)。[60] Sandeep Sharma 和 Garnet Kin Chan。“面向量子化学的自旋适配密度矩阵重整化群算法”。The Journal of chemical physics136 (2012)。[61] Sebastian Keller 和 Markus Reiher。“自旋适配矩阵乘积态与算子”。The Journal of chemical physics144 (2016)。[62]Sukhwinder Singh 和 Guifre Vidal。“存在全局 su (2) 对称性时的张量网络态与算法”。Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics 86, 195114 (2012)。[63] Nikita Gourianov、Michael Lubasch、Sergey Dol- gov、Quincy Y van den Berg、Hessam Babaee、Peyman Givi、Martin Kiffner 和 Dieter Jaksch。“利用量子启发式方法开发湍流结构”。Nature Computational Science 2, 30–37 (2022)。[64]Erika Ye 和 Nuno FG Loureiro。“求解 vlasov- poisson 方程的量子启发式方法”。Physical Review E 106, 035208 (2022)。[65] Shang Xian Matthew Lee、Melissa Kozul、Muhammad Usman、Martin Sevior、Matthew L Sims-Goh 和 Richard D Sandberg。“用于瞬态湍流可压缩流的量子启发式计算流体力学”（2026）。url: https://arxiv.org/abs/2608.26995。[66] Garnet Kin-Lic Chan 和 Sandeep Sharma。“量子化学中的密度矩阵重整化群”。

Annual review of physical chem- istry 62, 465–481 (2011)。[67]Sandeep Sharma、Kantharuban Sivalingam、Frank Neese 和 Garnet Kin-Lic Chan。“直接从多粒子量子力学获得铁硫簇的低能谱”。Nature chemistry 6, 927–933 (2014)。[68] Alberto Baiardi 和 Markus Reiher。“化学与分子物理学中的密度矩阵重整化群：近期进展与新挑战”。The Journal of Chemical Physics152 (2020)。[69] Huanchen Zhai、Henrik R Larsson、Seunghoon Lee、Zhi-Hao Cui、Tianyu Zhu、Chong Sun、Lin- qing Peng、Ruojing Peng、Ke Liao、Johannes Tölle 等。“Block2：用于开发和应用电子结构及其他领域最先进密度矩阵重整化群算法的综合开源框架”。The Journal of Chemical Physics159 (2023)。[70] Andor Menczer 和 Örs Legeza。“人工智能加速器上的张量网络态算法”。Jour- nal of Chemical Theory and Computation 20, 8897–8910 (2024)。[71]Andor Menczer、Maarten van Damme、Alan Rask、Lee Huntington、Jeff Hammond、Sotiris S Xantheas、Martin Ganahl 和 Ors Legeza。“密度矩阵重整化群方法的并行实现：在单个 DGX-H100 GPU节点上达到每秒千万亿次浮点运算性能的四分之一”。Journal of Chemical Theory and Compu- tation 20, 8397–8404 (2024)。[72] Chunyang Xiang、Weile Jia、Wei-Hai Fang 和 Zhendong Li。“分布式多GPU从头算密度矩阵重整化群算法及其在固氮酶P簇中的应用”。Journal of Chemical Theory and Computation 20, 775–786 (2024)。[73]Ors Legeza、Andor Menczer、Ádám Ganyecz、Miklós Antal Werner、Kornél Kapás、Jeff Ham- mond、Sotiris S Xantheas、Martin Ganahl 和 Frank Neese。“通过人工智能加速器优化大型活性空间的轨道”。Journal of Chemical Theory and Computation 21, 6545–6558 (2025)。[74]Viktor Khinevich 和 Wataru Mizukami。“容错量子计算机上用于量子化学的对称性适配态制备”（2026）。url:https://arxiv.org/abs/2601.08533。[75] Josef Paldus。“原子与分子系统组态相互作用及微扰理论计算的群论方法”。The Journal of Chemical Physics 61, 5321–5330 (1974)。[76] Isaiah Shavitt。“多电子关联问题”。《国际量子化学杂志》12，131–148（1977）。[77] Isaiah Shavitt。“幺正群方法中的矩阵元计算：电子关联问题”。《国际量子化学杂志》14，5–32（1978）。[78]Roger Penrose。“负维张量的应用”。载于 D. J. A. Welsh 编，《组合数学及其应用》。第221–244页。Academic Press，伦敦（1971）。[79] Jacob C Bridgeman 和 Christopher T Chubb。“凭空挥手与诠释性舞蹈：张量网络入门课程”。《物理学杂志A：数学与理论》50，223001（2017）。[80] J. J. Sakurai 和 Jim Napolitano。“现代量子力学”。剑桥大学出版社。（2017）。第2版。[81] Edward Uhler Condon 和 George Hiram Shortley。“原子光谱理论”。剑桥大学出版社。（1935）。[82]Ron Shepard。“电子波函数的一般非线性展开形式”。《物理化学杂志A》109，11629–11641（2005）。[83] Werner Dobrautz、Simon D Smart 和 Ali Alavi。“通过图形化酉群方法在自旋本征基中高效构建全组态相互作用量子蒙特卡罗方法”。《化学物理学杂志》151（2019）。[84] Zhendong Li 和 Garnet Kin-Lic Chan。“自旋投影矩阵乘积态：强关联体系的多功能工具”。《化学理论与计算杂志》13，2681–2695（2017）。[85]Javier Robledo-Moreno、Mario Motta、Holger Haas、Ali Javadi-Abhari、Petar Jurcevic、William Kirby、Simon Martiel、Kunal Sharma、Sandeep Sharma、Tomonori Shirakawa 等。“量子中心型超级计算机上超越精确对角化规模的化学研究”。《科学进展》11，eadu9991（2025）。[86]Matthew P Harrigan、Tanuj Khattar、Charles Yuan、Anurudh Peduri、Noureldin Yosri、Fionn D Malone、Ryan Babbush 和 Nicholas C Rubin。“使用 Qualtran 表达和分析量子算法”（2024）。url: https://arxiv.org/abs/2409.04643。[87] Guang Hao Low、Vadym Kliuchnikov 和 Luke Schaeffer。“在态制备和酉综合中以脏量子比特换取 T 门 ”。Quantum 8，1375 （ 2024 ）。[88] Dave Bacon、Isaac L Chuang 和 Aram Harrow。“量子舒尔变换：I. 高效量子位电路”（2005）。[89] Matthew R. Hennefarth、Lesley Gover、Carys Harvey、Zheting Jin、Ryan Levy、Sukin Sim、

以及 Modjtaba Shokrian Zini。《Quantum 荷和自旋适配矩阵乘积态的加载》（2026年）。网址：https://arxiv.org/abs/2611.19728。

《量子化学的自旋适配态制备》附录

这里给出本文主要结果的补充细节，安排如下。在附录 A 中，我们详细介绍如何从自旋适配 DMRG 代码中获取输入张量，包括这些张量必须满足的符号和归一化约定（附录 A.1），以及第 4 节数值结果背后的 DMRG 计算（附录 A.2）。在附录 B 中，我们概述用于 MPS 制备的浮动键构造：将键寄存器置于尚未制备的量子比特上，从而无需使用专用的键辅助量子比特。

A 自旋适配 DMRG 代码的输入

A.1 符号约定和归一化

以下三个约定确定了方程 (27) 中各个振幅的符号：(i) Clebsch-Gordan 系数中的耦合顺序：右块在前、轨道在后，并采用定义 4 中的 Condon-Shortley 相位；(ii) 方程 (19) 中的算符顺序：轨道 i 的产生算符位于右块产生算符的左侧，因此每个基向量均为 $A_1^\dagger A_2^\dagger \cdots A_d^\dagger |\mathbf{0}\rangle$，其中轨道索引向右递增，遵循第 2.1 节交错的 Jordan-Wigner 顺序；(iii) 方程 $a_\uparrow^\dagger a_\downarrow^\dagger |\emptyset\rangle$ 中的双重占据态 (20)。这些是本工作的约定。引理 1 依赖于这些约定：在这些选择下，步向量矩阵乘积态的振幅就是第 2.5 节 CSF 基中量子态的系数。

当张量取自 DMRG 库时，这些约定就很重要，因为库可能采用不同的选择；尤其是自旋适配代码，约定差异可能相当显著。本工作采用该库的约定 `block2` [69]，详见第4节。若一次计算最后一轮扫描方向为从右向左，使正交中心位于格点1，则其张量的存储方式与本文的假设一致：采用右规范，键上携带右块的量子数。按这种方式理解，`block2` 与 (ii) 和 (iii) 一致，但先耦合轨道、再耦合右块，这与 (i) 的顺序相反。

反转这三种约定中的任意一种，或全部三种，都会使每个振幅乘以(-1)，其指数为其中自旋耦合为负的步数 $\delta_i = 2$，整体符号除外。反转其中两种，相当于对键施加规范变换并乘以一个整体符号，且量子态保持不变。因此，通过将自旋耦合为负的步中每个块乘以 -1，即可将源自 `block2` 的张量转换为本工作的约定，无需其他更改（前提是 DMRG 以从右向左的扫描结束）。制备多重态（$S > 0$）时，以从右向左的扫描结束还有第二个原因：一个键上的多重态数量，按左块和右块描述时并不相同（第2.4.2节）；而本工作量子电路的成本由后者决定，因此必须按右块描述施加键维数 χ。

对于任何其他库，在加载其张量之前都必须仔细核对这些约定，归一化也同样如此：只有当完整元素恰好通过一个克莱布什–戈尔丹系数从存储的张量中恢复出来时，该张量才是方程 (24) 中的约化张量；因此，像 $\sqrt{2S_i+1}$ 这样代码并入张量的依赖于扇区的因子，在加载前必须先消去。

A.2 本文的密度矩阵重整化群计算

第 4 节研究的两个态来自自旋适配 DMRG 计算，其 `block2` [69] 遵循与参考文献 [20]一同发表的脚本。这些计算采用双站点密度矩阵重整化群算法，并关闭点群对称性；初始矩阵乘积态为随机态。轨道按菲德勒排序排列，使交换积分较大的轨道在链上彼此靠近 [69]。表 3给出了扫描计划，最终达到$\chi = 1000$ 个多重态。最后一次扫描必须从右向左进行，以确保存储的张量形式与量子电路所采用的形式一致（附录A.1）；若扫描计划以相反方向结束，则增加一次无噪声扫描，以恢复本文的约定。

表3 还给出了每个最终态的能量和舍弃权重。该 $[Fe_4S_4]^{2-}$ 计算在未满足其收敛判据的情况下完成了整个调度过程。与使用 DMRG 直接计算基态不同，收敛并不是 QPE 引导态制备的目标。之所以需要 QPE，恰恰是因为对于这些系统，在可承受的键维数下 DMRG 无法收敛；而对于能够收敛的系统，它们已经可以通过经典方法求解，此时 DMRG 量子态则通过其与基态的重叠发挥作用。无论如何，第 4节的比较不受影响，决定态制备成本的是多重态、它们所属的扇区及其重数，而不是其振幅本身的细枝末节。

表3： **密度矩阵重整化群计算**。 (a) 扫描计划，摘自与参考文献 [20]中发布的脚本。 χ是键上保留的多重态数量的最大值；当能量变化小于 10^{-7}Ha 时，扫描将在一次扫描到下一次扫描之间提前停止。(b) 计算结束时所处的态。舍弃权重取最后一次扫描中的最大值。

(a)

扫描	χ	噪声	Davidson阈值
1–4	200	10^{-4}	10^{-4}
5–8	400	10^{-4}	10^{-4}
9–12	600	10^{-4}	10^{-4}
13–16	800	10^{-4}	10^{-4}
17–20	1000	10^{-4}	10^{-4}
21–24	1000	10^{-5}	10^{-5}
25–28	1000	10^{-6}	10^{-6}
29–32	1000	10^{-7}	10^{-7}
33–38	1000	0	10^{-8}

(b)

	$[Fe_2S_2]^{2-}$	$[Fe_4S_4]^{2-}$
能量（Ha）	-5092.871026	-8432.791493
舍弃权重	1.3×10^{-6}	1.4×10^{-4}
上一次扫描的能量变化（Ha）	-6×10^{-9}	-5×10^{-7}

B 浮动键矩阵乘积态制备

参考文献 [19, 20] 中的顺序 MPS 制备方案除了 $2d$ 系统量子比特外，还使用了一个专用的键寄存器，其中包含 $w = \lceil \log_2 \chi \rceil$ 个量子比特。在此我们指出，键寄存器也可以沿着 $2d$未初始化的系统量子比特“浮动”，从而无需使用 w 专用辅助量子比特。节省的 w 量子比特数量很少，但在空间受限的编译中并非无关紧要：基于 QROM 的加载可以将闲置的逻辑量子比特转化为更少的托佛利门数量 [8, 87]。

我们希望制备一个矩阵乘积态 $|\Psi\rangle$，公式 (2)，并通过密度矩阵重整化群进行优化。该矩阵乘积态有 d 个维数为 D 的格点（对于标准占据数基中的一个空间轨道，维数为 $D = 4$，即 $\{|\emptyset\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$），其中 M_i^σ 的形状为 $\chi_{i-1} \times \chi_i$，且包含 $\chi_0 = \chi_d = 1$；张量选取为右正则规范形式，公式 (4)（因此这些张量是可通过酉操作实现的等距映射）。在本附录中，我们将物理指标 $\sigma \in \{0, \ldots, D-1\}$ 和键指标 $\alpha_i \in \{0, \ldots, \chi_i - 1\}$ 从零开始编号。记 $w_i \equiv \lceil \log_2 \chi_i \rceil$ 为切分 i 处容纳键指标所需的量子比特数（因此 $w_0 = w_d = 0$），注意到浮动键寄存器始终可容纳在未初始化的系统量子比特中：

命题 3 (适配界)。 令 $p \equiv \lceil \log_2 D \rceil$ 表示每个格点的量子比特数，且 $w_i \equiv \lceil \log_2 \chi_i \rceil$。那么 ***(i)***$w_{i-1} \le w_i + p$ 且 ***(ii)*** $w_i \le p(d-i)$；也就是说，切分 i 处的键指标始终可容纳在格点 $i+1$、.....、 d的未初始化系统量子比特中。

证明。 矩阵 $\chi_{i-1} \times D\chi_i$ $[M_i^0 \cdots M_i^{D-1}]$根据右正则性具有标准正交行，见公式（4），因此$\chi_{i-1} \le D\chi_i \le 2^p \chi_i$，这意味着 (i) 成立；从右边界开始迭代可得 $\chi_i \le D^{d-i}\chi_d$，且 $w_i \le \lceil (d-i)\log_2 D \rceil \le p(d-i)$ 由此得到 (ii)。 □

从这里开始，使用浮动键构造制备矩阵乘积态，只需以正确的形状在正确的键上应用 M_i^σ等距映射。我们将 $\alpha \in \{0, \ldots, \chi_i - 1\}$ 的二进制编码（用 w_i 位补零；任意块的基态按最低有效位在前的顺序读作整数）记为 $\mathrm{enc}(\alpha) \in \{0,1\}^{w_i}$，并按 Jordan-Wigner 顺序将 pd 个系统量子比特标记为 $q_1, \ldots, q_{pd}$，其中格点 i映射到 $Q_i \equiv (q_{p(i-1)+1}, \ldots, q_{pi})$。随后，态制备作用于一个滚动的“窗口” $W_i \equiv (q_{p(i-1)+1}, \ldots, q_{pi+w_i})$；窗口左侧每经过一次等距映射便向右移动$p$ 个量子比特，而右侧则根据 χ_i移动（或保持不动），从而动态地使窗口适应该键所包含的纠缠信息量。更准确地说，我们必须构造酉算子 $U_1, \ldots, U_d$，使得

$$U_i \cdots U_1 |0\rangle^{\otimes pd} = \sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_i} \sum_{\alpha_i=0}^{\chi_i - 1} \left(M_1^{\sigma_1} \cdots M_i^{\sigma_i}\right)_{0,\alpha_i} |\sigma_1\rangle_{Q_1} \cdots |\sigma_i\rangle_{Q_i} \otimes |\mathrm{enc}(\alpha_i)\rangle_{q_{pi+1} \ldots q_{pi+w_i}} \otimes |0\rangle^{\otimes (pd - pi - w_i)} . \quad (53)$$

迭代应用于 $|0\rangle^{\otimes pd}$ 后，我们看到，这可由将其映射为下式的酉算子实现

$$U_i : \quad |\mathrm{enc}(\alpha_{i-1})\rangle |0 \cdots 0\rangle \longmapsto \sum_{\sigma_i} \sum_{\alpha_i=0}^{\chi_i - 1} \left(M_i^{\sigma_i}\right)_{\alpha_{i-1},\alpha_i} |\sigma_i\rangle_{Q_i} |\mathrm{enc}(\alpha_i)\rangle_{q_{pi+1} \ldots q_{pi+w_i}} . \quad (54)$$

传入编码 $|\mathrm{enc}(\alpha_{i-1})\rangle$ 占据了 $w_{i-1} \le w_i + p$ 的前导量子比特 W_i (命题 3(i))，其余窗口量子比特处于 $|0\rangle$；而传出编码占据了 W_{i+1} 的前导量子比特；因此，这些映射按所述方式复合，浮动键寄存器不会溢出到 pd 系统量子比特之外（命题 3(ii)），并且由方程 (53) 和 (2) 可得 $U_d \cdots U_1 |0\rangle^{\otimes pd} = |\Psi\rangle$。

最后，我们注意到，根据方程 (54)，实现 U_i 只需综合一个 χ_{i-1} 列的 2^{p+w_i}维酉算子，其列 α 恰好就是重塑后的张量

$$\tilde{V}_i[\sigma + 2^p \alpha', \alpha] := (M_i^\sigma)_{\alpha\alpha'}, \tag{55}$$

也就是说，参考文献 $[M_i^0 \cdots M_i^{D-1}]^T$中的等距映射 [19]，其行经过经典方式重新索引，使物理标签位于 p 最低位。由于这种重新索引仅对行和列重新标记，块稀疏 M_i 仍保留其块及块大小，因此该过程与参考文献 [19], 第 III 节中的方法完全对应，也包括参考文献 [20], 中针对步向量矩阵乘积态的块稀疏变体，其中采用推论1 的块。需要注意的是，与采用专用键寄存器的实现相比，这本身并不会改变托佛利门数量：一旦通过不消耗托佛利门的 SWAP 门网络将输入索引旋转到位，这种寄存器就能施加相同的 $(p + w_i)$量子比特酉算子。对于靠近边缘、未达到键维数上限的张量 χ，输出 $\chi_i \le \chi$ 振幅的量子只读存储器成本会降低（例如，最后一个等距映射的查找规模从 $D\chi$ 个条目缩减为一个 p量子比特酉算子），因此这两种布局都能获得这些节省；相较于对标准构造的精心实现，这纯粹节省了 $\lceil \log_2 \chi \rceil$ 个辅助量子比特。

根据推论1，定理 1 中的格点等距映射就是右规范步向量矩阵乘积态的块稀疏制备所用的等距映射，因此浮动键构造可直接应用于这些映射（$D = 4$, $p = 2$ 以及第3.3节代码中的各步）。逆克莱布施-戈丹变换 $\hat{} K_{S_i}$ 仅作用于 Q_i 和 M 寄存器，S_i 则从 Q_i之后量子比特上的键指标中读出，因此定理 1 的量子电路可在工作空间之外的 $2d + n_M$ 个量子比特上制备 $|\Psi_{SM} \otimes |0_M$，相比单独使用键寄存器，最多可节省 $\lceil \log_2 \max_i \chi_i \rceil$ 个量子比特。若要像第 3.5 节所述那样实现 S_i 的免费读出，应将自旋保存在专用辅助寄存器中，而不是浮动键寄存器中：第 3.5 节中的自旋寄存器包含 $n_S = \lceil \log_2(d+1) \rceil$ 个量子比特，用于保存 S_i的副本，并在每个格点根据步进行更新。若将扇区作为浮动键指标的额外字段存储，则可能使其宽度超过 w_i，从而无法再放入未初始化的量子比特中。不使用自旋寄存器时，S_i 由第 3.5 节的查表从 enc(α) 中读出。