

## Раздел II. Математическое моделирование

---

*Ю. И. Ожигов<sup>1</sup> И. Р. Плужников<sup>2</sup>*

### **НАЛОЖЕНИЕ И АНТАГОНИЗМ ЦЕПОЧЕК ПРИ СИНТЕЗЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЗАПУТАННЫХ БИФОТОНОВ В УПРАВЛЕНИИ\***

#### Введение

Синтез полимерных цепей с особыми связующими свойствами между ними является актуальной задачей, которая находит множество применений, поскольку определяет свойства материала, изготовленного из таких полимеров. Склеивание полимеров может иметь, например, форму фотосшивания - такие полимеры используются в биологических приложениях (см. [1]); схема этого процесса в упрощенном виде представлена на рисунке 1. Случайные массивы пептидов используются при тестировании вакцин; эффект иммуносигнализации с ними рассматривается в [2]. Задача синтеза биополимеров с антибактериальными свойствами актуальна с прошлого века (из множества недавних результатов см., например, [3]). Сборка часто выполняется из пары типов мономеров - типичным примером является стирол-бутадиеновый каучук, полимер которого создается из двух типов мономеров (см. рисунок 2).

Однако свойства полимерных цепных массивов зависят от типа их взаимодействия, которое, в свою очередь, определяется на стадии их синтеза - как тонкие свойства соединения моноблоков, определяющие их пространственное расположение. В простейшем случае взаимодействие можно представить как склеивание полимеров в отдельных секциях. В этой статье мы рассмотрим квантовый контроль синтеза абстрактных полимерных цепей из двух мономерных звеньев. Этот контроль, осуществляемый через запутанное состояние пары фотонов, позволяет нам достичь такой дифференциации степени склеивания различных цепей, которая недостижима при классическом контроле.

---

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики. Российская академия наук имени К.А.Валиева, Москва, Россия.

<sup>2</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики.

\*Статья была подготовлена в Московском центре фундаментальной и прикладной математики.

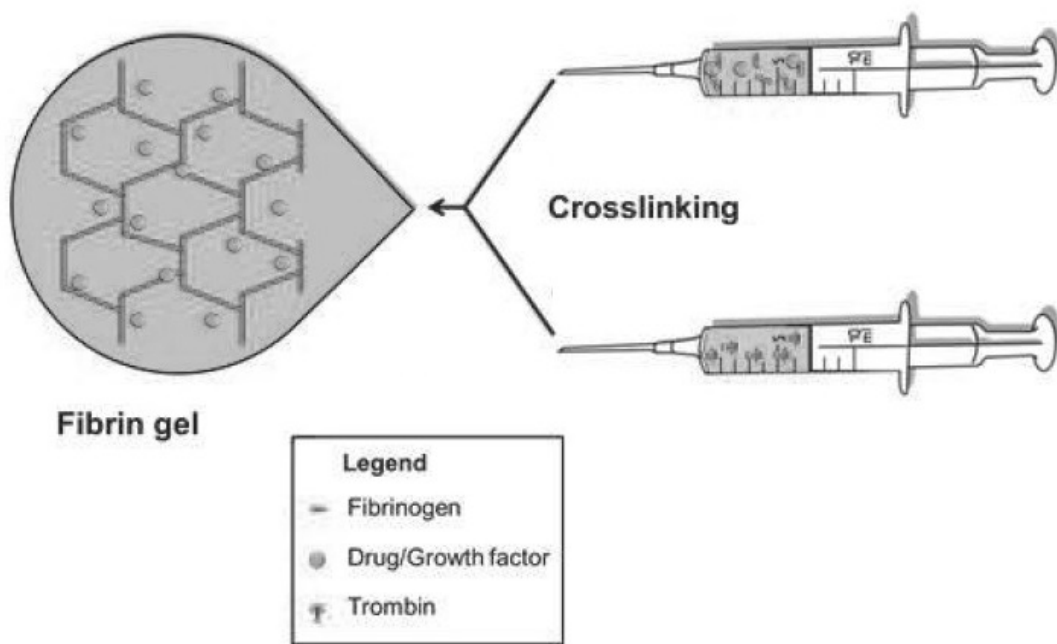


Рис. 1. Самая простая форма склеивания: приготовление фибринового геля. Изображение, адаптированное из [1].

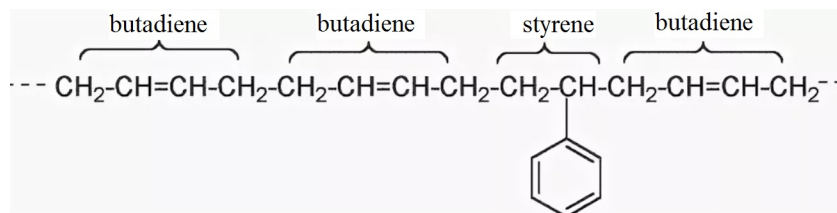


Рис. 2. Стирол-бутадиеновый полимер.

Возможность такого тонкого различия между структурой полимерных цепей одинаковой природы основана на свойстве квантовой нелокальности фотонов, управляющих синтезом цепочек, а именно на нарушении неравенства Белла для бифотонов в состоянии ЭПР.

Квантовая нелокальность, вытекающая из экспериментально подтвержденного нарушения неравенства Белла, является наиболее ярким проявлением контр-интуитивного характера микромира. Эксперимент, придуманный Беллом в 60-х годах двадцатого века и реализованный через 20 лет (см. [4], [5]), показал фундаментальность квантовой теории и приоритет ее духа над классическим пониманием природы. Дискуссии о природе квантовой нелокальности продолжаются уже более полувека (см., например, [6]), подходы к пониманию этой природы предлагаются также и через различные протоколы информационного обмена, например, через нелокальные игры (см. [7]). Эксперименты по запутыванию

фотонов включают получение многомерной запутанности по модам момента импульса бифотонных пар ([8], а также четырех фотонов ([9]).

Нелокальность формально вытекает из существования запутанных многочастичных состояний, простейшим из которых является двухкубитное состояние  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle)$ , где знак  $+$  дает триплет  $|t\rangle$ , а знак  $-$  синглет  $|s\rangle$ . Оба эти состояния обладают максимальной степенью запутанности, которая определяется как энтропия  $tr(\rho_1 \ln(\rho_1))$  относительной матрицы плотности первого кубита. Запутанность лежит в основе и так называемого квантового ускорения классических вычислений (см. [10]). Однако если превосходство масштабируемого квантового компьютера требует полномасштабного функционирования ансамбля из сотен кубитов, то на более ограниченных моделях вычислений это превосходство можно продемонстрировать с несколькими кубитами, что лежит в пределах современных возможностей экспериментальной физики. Данная работа посвящена такой ограниченной модели - распределенным вычислениям с односторонним управлением.

Выяснение роли квантовой нелокальности в управлении распределенными вычислениями позволит нам более полно понять природу этого феномена, но и обещает дать практический эффект, позволив найти более эффективные формы такого управления. Для бифотонного управления пример такого управления приведен в работе [11]. В данной работе мы усилим этот результат, показав, что запутанные квартеты фотонов в аналогичной задаче дают более сильный эффект.

Критерий квантового превосходства над классическими вычислениями в распределенных вычислениях дается не в терминах времени вычисления а через качество результата вычисления. Качество выявляется после сопоставления результатов в различных удаленных узлах вычислительной системы, что требует коммуникации между этими узлами со световой скоростью, поэтому подобные протоколы не могут превзойти световой порог для передачи задуманной пользователем информации. Тем не менее именно нелокальность создает качественное превосходство квантовой модели над классическими распределенными вычислениями.

### Нарушение неравенства Белла

Эксперимент, предложенный Беллом состоит в следующем. Двум персонам - Алисе и Бобу раздаются по одному кубиту из пары кубитов, после чего каждый из них производит измерение своего кубита в произвольно выбранном с вероятностью  $1/2$  базисе из двух: для Алисы выбор происходит между базисом из собственных векторов операторов  $\sigma_x$  и  $\sigma_z$ , для Боба - из собственных векторов операторов  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z)$  и

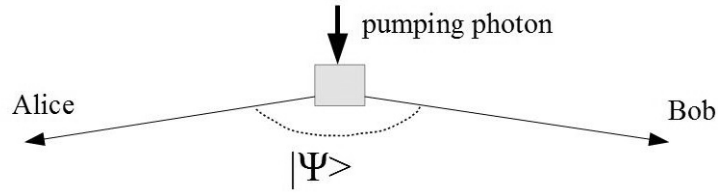


Рис. 3. Эксперимент Белла. Алиса выбирает между  $\sigma_x$  и  $\sigma_z$ , Боб - между  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z)$  и  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x - \sigma_z)$ .

$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x - \sigma_z)$ . Результатом измерения считается собственное число, соответствующее измерению - оно во всех случаях будет  $\pm 1$ .

Обозначим через  $a$  и  $b$  результаты измерения Алисы при выборе базиса, соответствующего операторам  $\sigma_x$  и  $\sigma_z$  соответственно, а через  $X$  и  $Y$  - результаты измерения Боба при выборе базиса, соответствующего операторам  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z)$  и  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x - \sigma_z)$ . После измерения составим случайную величину  $\xi$ , равную  $aX$ ,  $aY$ ,  $bX$  - при выборе соответствующих базисов Алисой и Бобом, и  $-bY$  - при выборе базисов, соответствующих  $b$  и  $Y$ .

Нетрудно видеть, что в случае, если результат измерения любого участника не зависит от ориентации детектора другого участника, математическое ожидание величины  $\xi$  не может быть больше  $1/2$ , так как в этом случае мы можем записать  $M\xi = M\frac{1}{4}(aX + aY + bX - bY) = \frac{1}{4}M(a(X + Y) + b(X - Y)) \leq 1/2$ , где все вхождения  $a$ ,  $b$ ,  $X$  и  $Y$  есть одинаковые числа, и, следовательно, одна из скобок равна нулю, а другая по модулю равна 2.

Однако предположим, что пара фотонов, раздаваемых Алисе и Бобу, находится в состоянии  $|t\rangle$ . Тогда квантовый расчет математического ожидания по формуле  $M_\psi(A) = tr(A|\psi\rangle\langle\psi|)$  дает  $M\xi = 1/\sqrt{2}$ . Это означает, что результат измерения одного из участников зависит от ориентации детектора другого участника. Это и есть квантовая нелокальность. Она доказывает наличие мгновенного действия на расстоянии, так как выбор ориентации детектора может быть сделан в тот момент, когда фотон влетает в лабораторию Алисы, и ничто, движущееся со световой скоростью, не может достигнуть лаборатории Боба, чтобы повлиять на его результат.

"Знание" об ориентации детектора Алисы достигает лаборатории Боба со "скоростью" многократно превосходящей световую, что противоречит духу релятивизма. Удивительно то, что здесь нет противоречия букве теории относительности, так как данный канал невозможно использовать для передачи задуманной Алисой информации Бобу со сверхсветовой скоростью; для фиксации нарушения неравенства

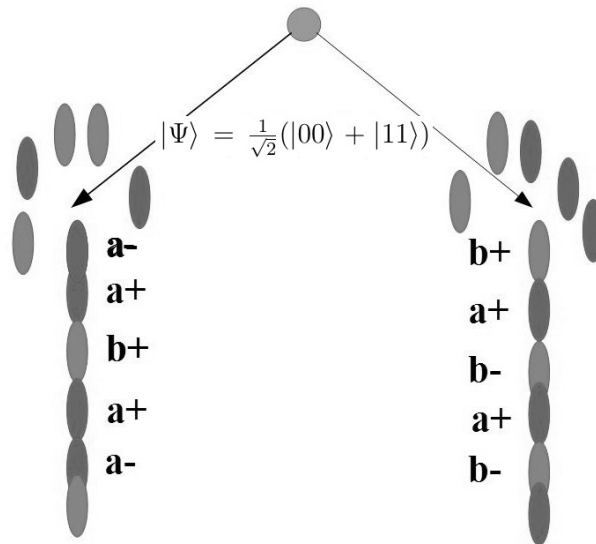


Рис. 4. Одновременный синтез пары полимеров. Знак определяется путем измерения фотона для Алисы (индекс 1) и Боба (индекс 2).

Белла надо свести вместе результаты измерения Алисы и Боба, что можно сделать только со скоростью света.

#### Задача синтеза полимерных цепочек

Квантовое преимущество имеет в своей основе запутанность, и наиболее явная его демонстрация дается с явным использованием нелокальности. С этой целью мы рассмотрим задачу на распределенные вычисления с односторонним управлением. Здесь вычислительная система состоит из массы распределенных в пространстве узлов, работа которых управляется сигналами со стороны одного центрального процессора, который может посылать либо классические состояния битов - по одному для каждого узла, либо кубиты, находящиеся в запутанном состоянии, которое мы обозначаем через  $|\Psi\rangle$ .

В нашей задаче речь пойдет об одновременном синтезе абстрактных полимерных цепочек в 4 удаленных друг от друга точках. Синтез заключается в присоединении к конечному звену цепочки нового звена - мономера, взятого наугад из резервуара, связанного с данной цепочкой. При этом подсоединение нового звена регулируется результатом измерения фотона, который попадает в связанный с данной цепочкой детектор. Результат измерения есть одно из чисел  $\pm 1$ , и это число определяет способ подсоединения нового звена к цепочке:  $+1$  означает подсоединение со сдвигом вперед,  $-1$  - со сдвигом назад.

Результат синтеза 4 цепочек определяется при их наложении друг на друга в виде индекса качества склейки: наложение тем качественнее, чем больше этот индекс. Мономеры - отдельные звенья цепочек, будут двух

типов, обозначаемых через  $a$  и  $b$ . Их структура схематически изображена на рисунке.

Индекс наложения цепочек  $Cr$  есть число склеивающихся мономеров. Каждый моноблок имеет внешнюю (выпуклую) и внутреннюю (вогнутую) поверхности, где последняя снабжена специальным шариком, расположенным в ее центре. В фиксированной позиции два моноблока могут склеиться в одном из следующих случаев: 1) их поверхности или половины поверхностей полностью совмещаются вертикальным смещением, или 2) их центральные шарики при таком сдвиге оказываются в одной точке, как показано на рисунке 5.

Физическая структура полимера, от которой зависит склейка, определяется не только последовательностью моноблоков в цепочке; склейка зависит также от дополнительной опции: их точного расположения относительно друг друга в цепочке. Соседние моноблоки в полимере соединены гибкой связью, которая может либо сжаться на  $dx$ , что составляет четверть длины моноблока, либо растянуться на такую же длину. Мы в этих случаях скажем, что моноблок сдвинут назад или вперед соответственно относительно положения равновесия связи. В ходе синтеза моноблоки устанавливаются с этими ограничениями и их позиции фиксируются. Затем две цепочки накладываются друг на друга и для каждой пары налегающих моноблоков устанавливается наличие склейки. Из принятого ограничения вытекает, что если в такой паре налегающих моноблоков они были сдвинуты в одну сторону, они склеиваются так же, как если бы сдвигов не было; а если в разные - результирующий сдвиг составляет половину длины моноблока.

Синтез цепочек происходит как последовательное присоединение к каждой из существующих цепочек нового моноблока - того, который первым появился в точке сборки одной и другой цепочки. Моноблоки берутся из среды, окружающей точки роста, где они находятся в хаотическом движении и оба типа распределены поровну. При этом можно сдвинуть вновь присоединенный моноблок либо назад, либо вперед на расстояние  $dx$ . Мы обозначим сдвиг вперед через  $+$ , сдвиг назад - через  $-$ . Каждая  $j$ -я пара моноблоков в обеих цепочках, наложенных друг на друга после синтеза, соответствуют, таким образом, четверке  $c_j^1 c_j^2 s_j^1 s_j^2$ , где последние два члена являются сдвигами  $s_j^{1,2} \in \{+, -\}$ .

Из наших правил (см. рисунок 5, где стрелки обозначают направление растяжения связей (серый цвет участков линий) между соседними моноблоками при синтезе полимера) следует, что склейка соответствует парам наложенных моноблоков вида:  $aa ++(--)$ ,  $ab ++(--)$ ,  $bb ++(--)$ ,  $ba + -(-+)$ , тогда как пары иного вида:  $aa + -(-+)$ ,  $ab + -(-+)$ ,  $bb + -(-+)$ ,  $ab ++(--)$  склейки не дают. Отметим несимметричное поведение моноблоков типа  $a$  и  $b$ : пары  $ab$  и  $ba$

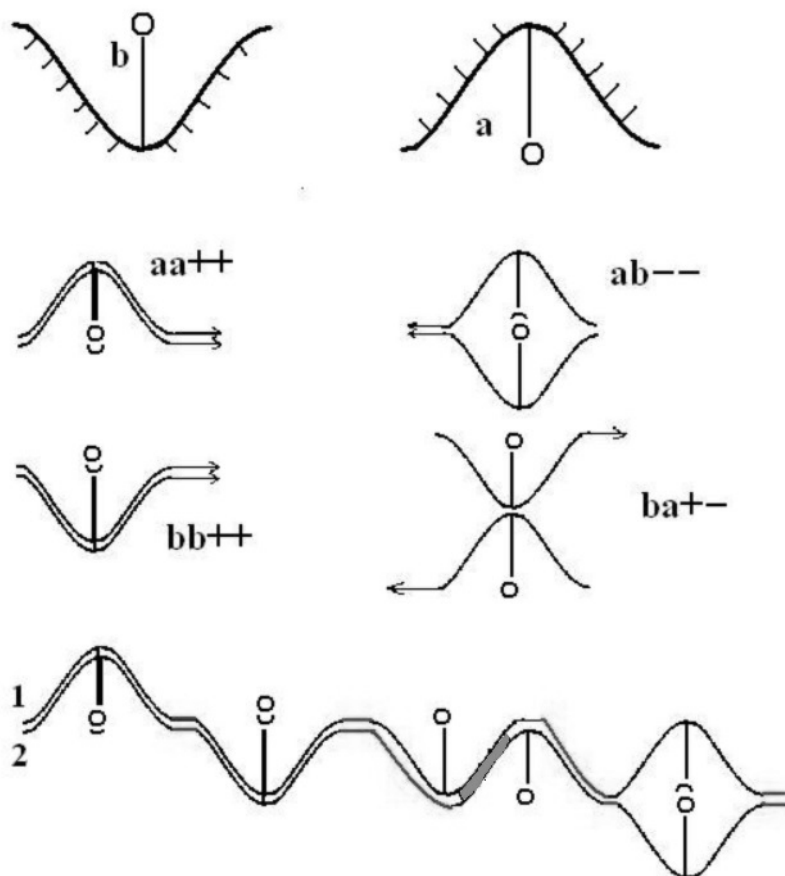


Рис. 5. Наложение двух полимеров. Наложения, показанные выше, а так же с обратными знаками, дают склейку, остальные склейки не дают. Внизу все пары дают склейки.

склеиваются по разному при одинаковых сдвигах. Эта асимметрия выглядит как асимметрия в неравенстве Белла, что и даст нам повышение качества результирующей склейки при бифотонном управлении по сравнению с классическим управлением.

Мы предполагаем, что рост полимера  $C_1$  идет в одной точке, а рост  $C_2$  - в другой, причем эти точки разделены большим расстоянием (например, происходят в разных странах). Задача в том, чтобы организовать этот синтез так, чтобы число несклеенных пар наложенных моноблоков была бы минимальной, или, иначе говоря, чтобы число склеек было максимальным.

В работе [11] показано, что управление синтезом цепочек с помощью бифотонных состояний вида  $|t\rangle$  дает выигрыш в индексе наложения более чем в 12% по сравнению с классическим управлением. Показывается это сведением к неравенству Белла. Индекс наложения двух полимеров можно посчитать по формуле  $Cr = \frac{1}{2}(1 + NonCr)$ , где  $NonCr$  - число наложений с хорошей склейкой. А случайная величина  $NonCr$  в

силу наших определений совпадает с  $\xi$ , так что ее математическое ожидание составит  $1/\sqrt{2}$ , что и дает нужный результат.

### Фотонные квартеты для синтеза 4 цепочек

Мы обобщим результат [11] на 4 полимерные цепочки, разделенные на пары по полу. Допустим, у нас есть 4 участника: Алиса, Наташа, Боб и Иван, и каждый из них синтезирует свою полимерную цепочку так, что Алиса и Наташа выбирают наблюдаемые между  $\sigma_x$  и  $\sigma_z$ , а Боб и Иван выбирают между  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z)$  и  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x - \sigma_z)$  соответственно, независимо друг от друга. Если вы разделите участников на фиксированные пары, например, Алиса-Боб, Наташа-Иван, и дадите каждой паре бифотон, выигрыши будут такими же, как и раньше. Но если с помощью такого управления вычислить индекс склеивания альтернативной пары, например, Наташи и Боба, мы получим более низкий индекс, чем в классическом контроле, так как между разными бифотонами нет когерентности.

Условия с максимальной дифференциацией склеивания "законных-незаконных" пар: Есть 4 состояния, которые дают хорошее наложение для пар Наталья-Боб и Алиса-Иван (0,85 - максимально возможное значение) и плохое (0,5 - минимально возможное значение) для пар Наталья-Иван, Алиса-Боб: это состояния

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(|0011\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1100\rangle) \\ & \frac{1}{2}(|0010\rangle + |0111\rangle + |1000\rangle + |1101\rangle) \\ & \frac{1}{2}(|0001\rangle + |0100\rangle + |1011\rangle + |1110\rangle) \\ & \frac{1}{2}(|0000\rangle + |0101\rangle + |1010\rangle + |1111\rangle) \end{aligned}$$

Есть также 4 состояния, которые дают плохое наложение для пар Наталья-Боб и Алиса-Иван и хорошее для пар Наталья-Иван и Алиса-Боб:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(|0010\rangle + |0100\rangle + |1011\rangle + |1101\rangle) \\ & \frac{1}{2}(|0001\rangle + |0111\rangle + |1000\rangle + |1110\rangle) \\ & \frac{1}{2}(|0000\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1111\rangle) \\ & \frac{1}{2}(|0011\rangle + |0101\rangle + |1010\rangle + |1100\rangle) \end{aligned}$$

Кроме того, максимальная разница в значениях индексов склеивания достигается только тогда, когда запутанные бифотоны распределяются по законным парам. Разница в 0,35 недостижима для классического управления.

### Случай трех участников

Мы предполагаем порядок кубитов: Алиса, Наталья, Боб - с теми же наблюдаемыми, что и в предыдущем разделе, и пусть пара Алиса, Боб будет законной парой. Максимальная дифференциация индексов склеивания для трех участников составляет 0,35 (0,5 для незаконной пары и 0,85 для законной пары, разница в 0,35 недостижима для классического



контроля), где законная пара имеет фотоны, запутанные друг с другом, а незаконная - нет. Это имеет биологический смысл: если Алиса - вредный антиген, Боб - антитело к нему, а Ева - собственный ген организма. Антитело атакует антиген и не затрагивает собственный ген организма. Это значение достигается при следующих условиях:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(|000\rangle + |010\rangle + |101\rangle + |111\rangle) = \frac{1}{2}(|0*0\rangle + |1*1\rangle)(|*0*\rangle + |*1*\rangle) \\ & \frac{1}{2}(|001\rangle + |010\rangle + |101\rangle + |110\rangle) \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |011\rangle) \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(|001\rangle + |010\rangle) \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(|010\rangle + |111\rangle) \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(|011\rangle + |110\rangle) \end{aligned}$$

Для случая четырех слогаемых можно распознать законную пару - зная, что 3-й участник включен в нее всегда, а само состояние - тензорное произведение 2-х состояний запутанной пары и двух состояний незаконного участника, вы можете увидеть, какая позиция (1 или 2) в конечном состоянии равны 1 и 0, чтобы "связать" с 3-м состоянием, получая две комбинации 00 и две 11 или две комбинации 01 и две 10. Для случая с тремя слогаемыми подходит аналогичный метод.

### Заключение

Мы рассмотрели задачу сравнения индекса склейки во всех гетеросексуальных парах цепочек, полученных путем одновременного синтеза 3 или 4 полимерных цепей в удаленных местах под односторонним контролем. Мы обнаружили, что использование бифотонных ЭПР пар позволяет достичь максимальной разницы в степени склеивания (наложения) между законными и незаконными парами. Этот результат недостижим для классического контроля.

Если цель состоит в том, чтобы увеличить склейку законной пары и в то же время усилить антагонизм для незаконной пары, то мы должны распределить пару EPR между законными участниками и оставить незаконную пару незапутанной с ними. Разница в индексе склеивания между легальными и нелегальными парами составит тогда 0,35.

Этот вывод сделан только для нашего искусственно построенного примера. Но этот пример напрямую опирается на главную особенность запутанности - нарушение неравенства Белла, следовательно, вывод применим к запутанному управлению для более широкого класса цепочек, собранных в удаленных местах, которые могут представлять интерес для квантовой биологии.

### Литература

1. *Ferreira P., Coelho J.F.J, Almeida J.F. and Gil M.H. Photocrosslinkable Polymers for Biomedical Applications, Biomedical Engineering - Frontiers*

and Challenges, Prof. Reza Fazel (Ed.), ISBN: 978-953-307-309-5, InTech, Available from: <http://www.intechopen.com/books/biomedical-engineering-frontiers-andchallenges/photocrosslinkable-polymers-for-biomedical-applications>

2. *Stafford P., Halperin, R., Legutki J.B., Magee D.M.; Galgiani J.; Johnston S.A. (2012-04-01). Physical Characterization of the "Immunosignaturing Effect. Molecular & Cellular Proteomics. 11 (4): M111.011593. doi:10.1074/mcp.M111.011593.*
3. *Rajam C., Roop D.S. Synthesis of Certain Random Copolymers Containing Arylidene Diol Moiety and Studies on Their Antibacterial Activity and Photocrosslinking Efficacy of Blend Nanofibers, International Journal of Science, Engineering and Technology Research (IJSETR), Volume 4, Issue 1, January 2015.*
4. *Pan J., Bouwmeester D., Daniell M., Weinfurter H., Zeilinger A. (2000). "Experimental test of quantum non locality in three-photon GHZ entanglement". Nature. 403 (6769): 515–519.*
5. Aspect, Alain; Dalibard, Jean; Roger, Gérard (December 1982). "Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers". *Physical Review Letters*. 49 (25): 1804–1807.
6. *Khrennikov A. After Bell. Fortschritte der Physik (Progress in Physics) 65, N 6-8, 1600014 (2017).*
7. *Araújo M, Hirsch f, Quintino M.T. Quantum 4, 353 (2020) DOI:10.22331/q-2020-10-28-353.*
8. *Kysela J., Erhard M, Hochrainer H., Krenn M., Zeilinger A. Experimental High-Dimensional Entanglement by Path Identity, PNAS 117(42), 26118-26122 (2020) DOI:10.1073/pnas.2011405117.*
9. *Erhard M., Malik M., Krenn M., Zeilinger A. Experimental GHZ Entanglement beyond Qubits, Nature Photonics 12, 759-764 (2018) DOI:10.1038/s41566-018-0257-6.*
10. *Grover L. A fast quantum mechanical algorithm for database search, Proceedings, 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC), May 1996, pages 212-219. Proceedings, Melville, NY, 2006, vol. 810.*
11. *Ozhigov Y. Distributed synthesis of chains with one-way bi-photon control, Quantum Information and Computation, Vol. 18, No. 7&8 (2018) 0592-0598.*