### Стрела времени и ее обращение на квантовом компьютере IBM<sup>1)</sup>

Г. Б. Лесовик<sup>1</sup>, И. А. Садовский<sup>2,3</sup>, М. В. Суслов<sup>1</sup>, А. В. Лебедев<sup>4</sup> и В. М. Винокур<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9. г. Долгопрудный, 141700, Мск область, Россия

<sup>2</sup> Materials Science Division, Argonne National Laboratory, 9700 S. Cass Av., Argonne, IL 60637, USA

<sup>3</sup> Computation Institute, University of Chicago, 5735 S. Ellis Av., Chicago, IL 60637, USA

<sup>4</sup> Theoretische Physik, ETH Zu"rich, Wolfgang-Pauli-Strasse 27, CH-8093 Zu"rich, Switzerland

Понимание сути происхождения стрелы времени остается фундаментальной научной проблемой. В рамках статистической физики, эта проблема была неразрывно связана со вторым законом термодинамики и с выводами о том, что рост энтропии обуславливается запутыванием системы с окружающей средой. Однако еще предстоит выяснить, является ли необратимость времени фундаментальный законом природы или, наоборот, его можно обойти. Здесь мы покажем что, в то время как в природе комплексное сопряжение, необходимое для обращения времени, экспоненциально маловероятно, можно разработать квантовый алгоритм, который включает комплексное сопряжение и, таким образом, обращает данное квантовое состояние по времени. Использование этого алгоритма квантовом компьютере IBM позволяет экспериментально на продемонстрировать обратную динамику времени для электрона, рассеянного на двухуровневой примеси.

I. Введение

II. Разворот распространяющегося волнового пакетаIII. Общий алгоритм обращения времени

IV. Эксперимент по обращению времени

V. Выводы

Список литературы

- A. Wave-packet reversal complexity
- B. Reversal of the qubit register dynamics
- C. Optimal phase shifts arrangement
- D. Boolean function time-reversal algorithm
- E. Simulation of scattering on a two-level impurity
- F. Time-reversal experiment

## **І. Введение**

На протяжении десятилетий исследователи пытались понять, как необратимость окружающего мира возникает из кажущихся симметричными по времени фундаментальных законов физики [1]. Этот вопрос так же стар, как и классическая статистическая механика [2-6], которая сама по себе представляла попытку разрешить эту загадку. Квантовая же механика вступила в противоречие с двумя важными предположениями. Первое, независимо предложенное Ландау [7] и фон Нейманом [8], постулирует, что необратимость создается процессами макроскопических измерений. Второе, следуя Вигнеру [9] утверждает, что операция обращения времени требует привлечения антиунитарных преобразований, поскольку требует комплексного сопряжения. Совсем недавно онтологический статус обращения времени, как симметрии квантовой механики и как версии теории вероятностной, подробно обсуждалась в [10, 11]. Из-за требования комплексного сопряжения универсальная операция обращения времени лежит вне квантовой области и не возникает спонтанно в природе. Вышеприведенные гипотезы, хотя и имеют решающее значение сами по себе, тем не менее представляют собой два разных ключа к одному и тому же замку. В этой статье мы раскрываем взаимосвязи между этими, казалось бы, несопоставимыми ключами. Известно, что диссипация является частным случаем унитарной эволюции, сопровождающейся запутыванием. Запутанность, в свою очередь, усложняет квантовые состояния, вовлекая все больше и больше степеней свободы, увеличивая сложность, что делает спонтанное обращение времени крайне маловероятным. Наше рассмотрение уточняет понимание необратимости по Ландау-фон Нейману. Как оказалось, процесс измерения можно описать как совместную унитарную эволюцию квантовой системы и макроскопического измерительного устройства. Полученная макроскопическая запутанность порождает

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup> arXiv: 1712.10057v [quant-ph] 24 Feb 2018. ( <u>https://arxiv.org/pdf/1712.10057.pdf</u> )

непреодолимую сложность процедуры обращения. Мы покажем, что, неожиданно, даже эволюция состояний одной или двух частиц в свободном пространстве порождает сложность, которая делает спонтанное обращение времени либо крайне маловероятным, либо фактически невозможным. Это говорит о том, что уравнение Шредингера, определяющее эволюцию квантовых систем, неявно влечет за собой необратимость, то есть и проявление стрелы времени в природе.

### **II.** Разворот распространяющегося волнового пакета

То, что в квантовой механике для выполнения операции обращения времени необходимо выполнить комплексное сопряжение волновой функции, означает, что оператор обращения времени  $\hat{T}$  является произведением оператора комплексного сопряжения  $\hat{\mathcal{K}}$  и унитарного вращения  $\hat{U}_R$ , т. е.  $\hat{T} = \hat{U}_R \hat{\mathcal{K}}$ , где для любой  $\psi$ ,  $\hat{\mathcal{K}}\psi = \psi^*$ . Эта операция отражает не только скорости, как в классической физике, но меняет и фазы компонент волновой функции. Общей универсальной операции, способной обратить вспять любую произвольную волновую функцию, в природе не существует. Тем не менее, некоторая специфическая ψ-зависимая операция такая, что  $\widehat{U}_{\psi}\psi = \psi^*$ может существовать, и ниже мы явно построим такую операцию для системы кубитов. Для этого нужно сконструировать надсистему, внешнюю по отношению к рассматриваемой системе и способную осуществлять целенаправленное манипулирование данной системой. В природе, в простейшем случае одной частицы, роль такой надсистемы может взять на себя, например, флуктуирующее электромагнитное поле. Чтобы получить представление о том, как это работает, рассмотрим волновой пакет, соответствующий частице с квадратичной дисперсией энергии  $\mathcal{E} = p^2/2m$ , где p – импульс частицы, а m – масса частицы, распространяющийся в пространстве (см. Рис.1). Электромагнитное поле считается преимущественно слабым, за исключением редких флуктуаций. Распространение волнового пакета когерентно. Основную часть времени волновой пакет распространяется как

$$\Psi(x,\tau) \cong \frac{f(xm/\hbar\tau)}{\sqrt{2\pi\hbar\tau/m}} e^{imx^2/2\hbar\tau}$$
(1)

где f(q) — Фурье-компонента начальной пространственной волновой функции. Фаза  $\psi$  изменяется в результате действия быстро флуктуирующего внешнего потенциала, т. е. с потенциалом, который изменяется со временем, значительно более коротким, чем характерное



Рис.1. Процедура обращения времени для гауссовского волнового пакета  $\psi(x, 0) \propto e^{\frac{z}{2\sigma^2}} = 1$  (a.e.). Волновой пакет распространяется  $\psi(x, 0) \to \psi(x, \tau)$  согласно квадратичному гамильтониану $\hat{p}^2/2m$  в течение временного интервала  $\tau = 3m\sigma^2/\hbar$ . В момент  $\tau$  система подвергается ступенчатому воздействию электромагнитного потенциала v(x) (вторая панель). Флуктуация приблизительно (с точностью, соответствующей плотности точек разбиения) сопряжена с фазой волновой функции:  $\varphi(x, \tau^{-0}) \to \tilde{\varphi}(x, \tau^{+0} = \varphi(x, \tau^{-0}) + ev(x, \tau)\delta r/\hbar)$  (третья панель). Подготовленное обратное по времени состояние  $\tilde{\psi}(x, 2\tau)$  затем свободно эволюционирует в течение того же интервала времени  $\tau$  и приходит в сжатое состояние  $\tilde{\psi}(x, 2\tau)$ (четвертая панель). Полученное состояние  $\tilde{\psi}(x, 2\tau)$  имеет 86% перекрытия с начальным состоянием  $\psi(x, 0)$ , показанным кривой под пустой оболочкой на четвертой панели.

время изменения фазы. Чтобы установить флуктуации комплексного сопряжения  $\Psi$ , разделим координатное пространство на большое число элементарных ячеек  $\delta x_n$ , где фаза волновой функции  $\varphi(x, \tau)$  изменяется медленно и будем искать быстрые электромагнитные колебания потенциала V (x; t) на фоне гладких по ячейкам, и возвращать фазы волновой функции:  $\int dt e V(x_n, t)/\hbar = -2\varphi(x_n, \tau)$ . Если в течение  $\tau$  волновой пакет (1) распространился от размера  $L_0$ до размера  $L_0 = \hbar \tau / m L_0$ , то потребуется  $N \sim \epsilon^{-1} / 2(L_\tau / L_0)$  элементарных ячеек, чтобы приблизительно восстановить квантовое состояние  $\psi(x, \tau) \rightarrow \widetilde{\psi}^*(x, \tau)$  с вероятностью  $1-\in$ :  $|\langle \widetilde{\psi}^*(x,\tau) | \psi^*(x,\tau) \rangle|^2 = 1 - \epsilon$  (см. Приложение А). Тогда вероятность самопроизвольного разворота, т. е. вероятность появления требуемых флуктуаций электромагнитного потенциала, оценивается как  $2^{-N}$ . Средний масштаб времени  $\tau$ , на котором спонтанное обращение во времени волнового пакета все еще может происходить в течение времени жизни Вселенной оценивается величиной  $\tau_{II} \sim 4.3 \times 10^{17}$ сек.. Последнее получаем из оценки  $2^{-N}$ , где число ячеек  $N \sim \epsilon^{-1/2} (\langle E \rangle \tau / \hbar)$ выражается через среднюю энергию частицы  $\langle E \rangle = \hbar^2 / m L_0^2$ . Если в качестве средней энергии волнового пакета взять энергию, соответствующую текущей температуре Вселенной 2.72К, то получим  $\tau \simeq 6 \times 10^{-11}$  сек. Таким образом, видно, что даже в простейшем возможном примере одной квантовой частицы обращение времени уже является сложной задачей, где даже при частотах в GHz требуемая флуктуация ненаблюдаема в течение жизни Вселенной.

Теперь рассмотрим более сложный пример и продемонстрируем, что сепарабельное состояние  $\psi(x_1, x_2) = |\psi(x_1)\psi(x_2)|e^{i\varphi_1(x_1)+i\varphi_2(x_2)}$  из двух частиц не может быть обращено классическими флуктуациями поля в случае, когда волновые функции частицы перекрываются. Пусть обе частицы имеют одинаковый электрический заряд q и взаимодействуют с классическим электрическим потенциалом v(x; t). Потенциальные флуктуации производят фазовые сдвиги  $\int dtqv(x,t)/\hbar$ . Соответственно, соответствующие флуктуации, способные обратить квантовое состояние, должны удовлетворять условию  $\varphi_1(x_1) + \varphi_2(x_2) + \int dt[qv(x_1,t) + qv(x_2,t)]/\hbar = -\varphi_1(x_1) - \varphi_2(x_2)$ . Для  $x_1 = x_2$  это означает  $\int dt qv(x,t)/\hbar = -\varphi_1(x_1) - \varphi_2(x)$ , и поэтому при  $x_1 \neq x_2$  удовлетворить условию  $\varphi_2(x_2) + \varphi_1(x_1) = \varphi_2(x_1) + \varphi_1(x_2)$  в общем случае невозможно.

Квантовая запутанность вводит следующий уровень сложности процедуры обращения  $\psi(x_1; x_2) = |\psi(x_1, x_2)| e^{i\varphi(x_1; x_2)}$ времени. Рассмотрим двухчастичное состояние c частицам) волновой несепарабельной (симметризованной по функцией  $\varphi(x_1; x_2) =_1 (x_1)b_1(x_2) + a_2(x_1)b_2(x_2)$ . В этой ситуации даже для неперекрывающихся частиц  $\varphi(x1; x2) = 0$  для x1 = x2с двухчастичное состояние не может быть обращено взаимодействием с классическими полями. Пусть доступ к частицам различными полями, которые индуцируют отдельные фазовые сдвиги:  $\psi(x_1, x_2) \rightarrow \psi(x_1, x_2) e^{i\phi_1(x_1) + i\phi_2(x_2)})$ . Индуцированные фазовые сдвиги должны удовлетворять соотношению:  $\phi_1(x_1) + \phi_2(x_2) = -2\varphi(x_1, x_2)$ , поэтому для любых трех точек  $x_1 \neq x_2 \neq x_3$  должны выполняться следующие условия:

Вычитая, получаем  $\phi_2(x_2) - \phi_2(x_3) = -2a_1(x_1)[b_1(x_2) - b_1(x_3)] - 2a_2(x_1)[b_2(x_2) - b_2(x_3)],$  где левая сторона не зависит от  $x_1$ , и поэтому нужно предположить, что  $a_1$  и  $a_2$  являются постоянными. Это, однако, противоречит предположению о несепарабельности  $\varphi(x_1, x_2)$ .

В результате рассеяния двух локализованных волновых пакетов может возникнуть запутанное двухчастичное состояние с непрерывной фазовой функцией [12]. Однако, как мы видели, генерация обращенного во времени состояния, в котором частица распутывается в ходе своей эволюции вперед во времени, требует специфических операций с двумя частицами, которые в целом не могут быть сведены к простому рассеянию двух частиц.

Из вышеизложенного можно сделать важные выводы о происхождении стрелы времени:

(i) для обращения времени нужна надсистема, манипулирующая данной системой. В большинстве случаев такая надсистема не может самопроизвольно возникнуть в природе.

(ii) даже, если такая надсистема возникнет для какой-то конкретной ситуации, для соответствующего спонтанного обращения времени обычно требуется время, превышающее время жизни Вселенной.

Надсистема такого рода может быть реализуема так называемым универсальным квантовым компьютером. Он способен эффективно моделировать унитарную динамику любой физической системы, наделенной локальными взаимодействиями [13]. Состояния системы кодируется в квантовые состоянии кубитов регистра компьютера, а его эволюция регулируются квантовой программой — последовательностью универсальных квантовых гейтов для кубитов регистра. В дальнейшем мы сначала сформулируем общие принципы построения алгоритмов обращения времени на квантовых компьютерах, а в следующем разделе представим практическую реализацию нескольких кубитных алгоритмов, которые позволили реализовать экспериментальную процедуру обращения времени на квантовом компьютере

### III. Общий алгоритм обращения времени

Рассмотрим квантовую систему, изначально подготовленную в состоянии  $\psi$  (t=0), и пусть она эволюционирует за время  $\tau$  в состояние  $\psi(\tau) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}\tau/\hbar} \psi(0)$ . Найдем минимальный размер кубитового регистра, необходимый для моделирования динамики системы  $\psi(0) \rightarrow \psi(\tau)$  с заданной точностью  $1-\epsilon$ . Выберем конечное множество интервалов времени  $t_i \in [0, \tau]$ ,  $i = 0, ..., \mathcal{N}'$ при условии  $|\langle \psi(t_i)|\psi(t_{i+1})\rangle|^2 = 1-\epsilon$  с  $t_0 = 0$  для некоторого малого  $\epsilon > 0$ . Тогда любой момент  $t \in [0, \tau]$  состояния  $\psi(t)$  может быть аппроксимирован дискретным множеством состояний  $\{\psi(t_i); i = 0, ..., \mathcal{N}'\}$  с точностью  $1-\epsilon$ . Множество состояний  $\psi(t_i)$  охватывает гильбертово подпространство S размерности  $\mathcal{N} \leq \mathcal{N}'$ . Таким образом,  $\mathcal{N}$  базисных векторов  $|e_i\rangle \in S$  могут быть представлена посредством  $\mathcal{N}$  ортогональных состояний кубитового регистра  $|e_i\rangle \rightarrow |\vec{b}_i\rangle \equiv |b_0b_1...\rangle$ . Соответствующий кубит гамильтониана  $\hat{H}$ , который имитирует оригинальный гамильтониана  $\hat{\mathcal{H}}$ , определяется соотношением  $(\hat{H})_{ij} \equiv \langle \vec{b}_i |\hat{H}|\vec{b}_j\rangle = \langle e_i |\hat{\mathcal{H}}|e_i\rangle$ .

Ниже мы вводим две процедуры кодирования  $|e_i\rangle \rightarrow |\vec{b}_i\rangle$ . Первая. В подходе разреженного кодирования (*sparse* coding approach) назначается отдельный кубит для каждого состояния  $|e_i\rangle$ ,  $i \in [0, \mathcal{N} - 1]$  а состояние  $\psi(\tau)$  кодируется в  $\mathcal{N}$ -кубитовое состояние  $|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{\mathcal{N}-1} \psi_i |0_0 \dots 1_i \dots 0_{\mathcal{N}-1}\rangle$ . Второе. Плотная схема кодирования (dense coding), в которой состояние  $\psi(\tau)$  записывается в состояние из  $n = \operatorname{int}[\log_2(\mathcal{N})] + 1$  кубит –  $|\psi(\tau)\rangle = \sum_{i=0}^{\mathcal{N}-1} \psi_i |i\rangle$ , где  $|i\rangle \equiv |b_0 \dots b_{n-1}\rangle$  является вычислительным базисным состоянием, соответствующим двоичному представлению числа  $i = \sum_{k=0}^{n-1} b_k 2^{n-1-k}$ 

Операция обращения времени  $\hat{R}$  кубитового регистра может быть представлена в виде произведения  $\hat{R} = \hat{U}_R \hat{K}$  оператора комплексного сопряжения  $\hat{K}$ ,  $\hat{K}(\psi_i|i\rangle) \equiv \psi_i^*$  и некоторого унитарного оператора  $\hat{U}_R$ , чья форма определяется гамильтонианом  $\hat{H}$ ,  $\hat{U}_R = U_H^{\dagger}U_H^*$ , где  $\hat{H} = U_H^{\dagger} \text{diag} \{E_1 \dots E_n\} \hat{U}_H$  (см. Приложение В). Поэтому для реализации операции обращения времени  $\hat{R}$ необходимо знать гамильтониан  $\hat{H}$  явно. Заметим, что квантовый компьютер способен моделировать унитарную динамику, управляемую произвольным гамильтонианом, включая те, которые не соответствуют какой-либо физической системе (например, с нелокальными гамильтонианами). Известно, что совместное преобразование зарядового сопряжения, инверсии четности и обращения времени рассматривается как точная симметрия всех известных законов физики, и, следовательно, кубитовый гамильтониан  $\hat{H}$ , соответствующий реальной физической системе, также должен соблюдать эту симметрию. Поэтому унитарная операция, описывающая эволюцию физической системы  $\hat{U}_R$ , в общем известна и представляет собой преобразование, унаследованное от симметрии обращения времени исходного гамильтониана  $\hat{\mathcal{H}}$ . В частности, если кубитный гамильтониан  $\hat{H}$  реален, то соответствующий оператор эволюции $\hat{U}(\tau) = e^{i \hat{H} \tau / \hbar}$ симметричен, что влечет за собой  $\hat{U}_R = 1$ .

В дальнейшем мы предполагаем, что унитарный  $\widehat{U}_R$  известен и сосредоточен на унитарной реализации операции комплексного сопряжения  $\widehat{K}$ ,  $\widehat{K} \to \widehat{U}_{ib}$ . В частности, мы количественно оцениваем сложность такой реализации, как ряд элементарных квантовых гейтов или/и вспомогательных кубитов, необходимых для реализации  $\widehat{U}_{m{\psi}}$ . Для разреженной схемы кодирования комплексное сопряжение  $\mathcal{N}$ -кубитного состояния  $|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{\mathcal{N}-1} |\psi_i| e^{i\varphi_i} |0_0 \dots 1_i \dots 0_{\mathcal{N}-1}\rangle$  может быть выполнено унитарной операцией  $\widehat{U}_{ij}^{(1)} = \prod_{i=0}^{N-1} \otimes \widehat{T}_i(-2\varphi_i)$ , где  $\widehat{T}_i(\varphi)$  – единичный кубит операции:  $\hat{T}_i(\varphi)|0_i\rangle = |0_i\rangle$  and  $\hat{T}_i(\varphi)|1_i\rangle = e^{i\varphi}1_i$ . Следовательно, разреженная схема кодирования вообще не требует более "расширенных" двухкубитовых гейтов, но требует большого количества N кубитов. Для плотной схемы кодирования ситуация противоположна: эта схема включает только логарифмически меньшее число n кубитов, но вместо требуется реализация  $2^n$  n-кубитных операций условного фазового сдвига  $\widehat{K} \to \widehat{U}_{\psi}^{(2)} = \sum_{j=0}^{2^n-1} |j\rangle \langle j| e^{-2i\varphi_j}$ , которые добавляют правильные фазы к каждой компоненте состояния  $|\psi\rangle$ :  $U_{\psi}^{(2)}|\psi\rangle = |\psi^*\rangle$ . Следовательно,  $U_{\psi}^{(2)}$ должен включать двухкубитовые гейты, т. е. условие - NOT (CNOT) гейты. Количественно сложность схемы плотного кодирования мы оцениваем числом N<sub>\omega</sub> CNOT гейтов, необходимых для реализации. Каждую операцию сдвига фазы  $\hat{\phi}_i(\varphi) \equiv |i\rangle \langle i| e^{i\varphi}$  можно построить с помощью n-1 вспомогательных кубитов и 2 (n-1) гейтов Тоффоли, как показано на Рис. 2(а). Для этого потребуется  $N_{\bigotimes}[U_{ib}^{(2)}] = 12(n-1)2^n \sim 12N \log_2(N)$  СNOT гейтов. Однако правильное расположение  $\widehat{\Phi}_i$  операций, показанных на рис. 2 (b) может уменьшить это число до линейной зависимости  $\mathcal{N}: N_{\bigotimes} \sim 24\mathcal{N}$  (см. Приложение С). Таким образом, мы приходим к выводу: *Число* элементарных операций, необходимых для точной процедуры обращения во времени динамики квантовой системы, которая в ходе своей эволюции охватывает гильбертово пространство размерности  $\mathcal{N}$ , ограничено сверху некоторым числом  $\mathcal{O}(\mathcal{N})$ .

### IV. Эксперимент по обращению времени

Теперь мы готовы провести эксперимент, реализующий двух- и трехкубитовые процедуры обращения времени с использованием общедоступного квантового компьютера IBM. Мы моделируем одномерное рассеяние частиц на двухуровневой примеси (TLI). Динамика примеси определяется гамильтонианом  $\hat{H}_i = \hbar \omega (\cos \alpha \, \hat{\sigma}_z + \sin \alpha \, \hat{\sigma}_x)$ . Потенциал рассеяния наблюдаемой частицей, зависит от состояния TLS. Соответствующий оператор рассеяния имеет вид  $\hat{S}_{\psi} = |0\rangle\langle 0| \otimes \hat{S}_0 + |1\rangle\langle 1| \otimes \hat{S}_1$ , где  $\hat{S}_0$  и  $\hat{S}_1$  – симметричные унитарные матрицы рассеяния TLI в состоянии  $|0\rangle\rangle$  или  $|1\rangle$ .

Задача рассеяния моделируется эволюцией кубитового регистра  $U_{nbit}|q_i\rangle \otimes (|q_1\rangle \otimes \cdots \otimes |q_n\rangle)$ , где  $|q_i\rangle$  кубит описывает состояние TLI, а остальные кубиты описывают состояние рассеянных частиц. Базисные состояния  $|0_i\rangle$  и  $|1_i\rangle$ ,  $i = 1, \ldots n$  соответствуют левому и правому входящему/исходящему состояниям *i*-й частицы. Мы рассматриваем процессы, в которых одна или две входящие частицы рассеиваются на свободно развивающемся TLI.

Соответствующие 2-кубитовые и 3-кубитовые операторы эволюции имеют вид:  $\hat{U}_{2\text{bit}} = \hat{U}_i(\tau) \cdot \hat{S}_{\psi}^{(1)} \cdot U_i(\tau)$  и  $U_{3\text{bit}} = \hat{U}_i(\tau) \cdot S_{\psi}^{(2)} \cdot \hat{U}_i(\tau) \cdot \hat{S}_{\psi}^{(1)} \cdot \hat{U}_i(\tau)$ , где  $\hat{U}_i(\tau) = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}$  описывает свободную эволюцию TLI, а  $S_{\psi}^{(i)}$ , i = 1,2,2-оператор рассеяния для *i*-й частицы. Соответствующие квантовые схемы, реализующие  $\hat{U}_{2\text{bit}}$ t и  $\hat{U}_{3\text{bit}}$ , показаны на Рис. 2(с) и 2(е), (см. подробную информацию в Приложении D).

Модель 2-кубитового рассеяния наделена симметричным оператором эволюции  $\hat{U}_{2\text{bit}}$  и, следовательно, для ее обращения во времени потребуется только операция комплексного сопряжения  $\hat{R} = \hat{K}$ . В противном случае оператор эволюции  $\hat{U}_{3\text{bit}}$  3-кубитовой модели несимметричен, и его обращение во времени потребует дополнительного унитарного вращения  $\hat{R} = \hat{U}_R \hat{K}$ . Это следует из соотношения SWAP<sub>12</sub> ·  $\hat{U}_{3\text{bit}}$  · SWAP<sub>12</sub> =  $\hat{U}_{3\text{bit}}^t$ , где SWAP<sub>12</sub> $|q_1\rangle \otimes |q_2\rangle = |q_2\rangle \otimes |q_1\rangle$  – обменная операция, которая потребует унитарной операции  $\hat{U}_R = \text{SWAP}_{12}$ .

Согласно результатам раздела III, унитарная реализация комплексного сопряжения для 2или 3-кубитового регистра потребует 48 или 144 СNOT-гейтов. Это выходят за рамки возможностей общедоступного квантового компьютера IBM из-за конечной частоты ошибок гейтов CNOT в 1,5-2,5%. Здесь мы используем альтернативу подхода SEC. III (подробнее см. Приложение D), которая основана на арифметическом представлении *n*-разрядной булевой функции AND [14]

$$b_0 \wedge b_1 \wedge \dots \wedge b_{n-1} = \frac{1}{2^{n-1}} \left( \sum_{i1} b_{i_1} - \sum_{i1 < i2} b_{i_1} \oplus b_{i_2} + \sum_{i_1 < i_2 < i_3} b_{i_1} \oplus b_{i_2} \oplus b_{i_3} + \dots + (-1)^{n-1} b_0 \oplus \dots \oplus b_{n-1} \right)$$
(2)

Этот подход более эффективен при малых n, поскольку он вообще не нуждается во вспомогательных кубитах и требует  $(n-1)2^{n-1}$  гейтов СNOT для комплексного сопряжения произвольного n-кубитного состояния, что перекрывает подход, обсуждаемый в разделе III для  $n \le 48$ . В частности, при n = 2 и 3 требуется только два или восемь гейтов CNOT, соответственно. Соответствующие 2-и 3-кубитовых квантовые схемы показаны на фиг. 2(с) и 2(f).

Эксперимент по обращению времени выполняется в несколько этапов: (i) кубитовый регистр, который первоначально устанавливается в состояние  $|\psi(0)\rangle = |0...0\rangle$ , совершает естественновременную унитарную эволюцию  $|\psi_0\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle = U_{nbit}|\psi_0\rangle$ .

Далее, (ii') применяется операция комплексного сопряжения  $\hat{K} = \hat{U}_{\psi}$ :  $|\psi_1\rangle \rightarrow |\psi_1^*\rangle = \hat{U}_{\psi}|\psi_1\rangle$  с последующим (ii'') унитарным преобразованием  $\hat{U}_R$ ,  $|\psi_1^*\rangle \rightarrow |\hat{R}\psi_1\rangle = \hat{U}_R|\psi_1^*\rangle$ . В результате генерируется обратновременное состояние  $|\hat{R}\psi_1\rangle$ . Наконец, на этапе (iii) применяется та же впередвременная унитарная эволюция  $|\hat{R}\psi_1\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}_0\rangle = U_{nbit}|\hat{R}\psi_1\rangle$  и регистрируется результирующее состояние регистра на расчётной основе. На практике, шаг  $2''|\hat{R}\psi_1\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}_0\rangle =$  $U_{nbit}|\hat{R}\psi_1\rangle$  необходим только для 3-кубитовой модели, где  $\hat{U}_R = \text{SWAP}_{12}$  требует трех дополнительных СNOT-гейтов. Чтобы сохранить число CNOT, мы заменяем оператор прямой эволюции  $\hat{U}_{3bit}$  на шаге (iii) новой операцией эволюции, полученной из  $\hat{U}_{3bit}$  через физический обмен двух кубитов частиц, а не для реализации операции SWAP<sub>12</sub> на шаге (ii'').

По завершении вышеупомянутый эксперимент по обращению времени снова переводит кубитовый регистр в исходное состояние  $|0...0\rangle$  с вероятностной единицей при условии, что все квантовые гейты совершены и никаких процессов декогеренции и релаксации нет. Примерный исход вероятностей  $P_{ij} = |\langle b_i b_j | \tilde{\psi}_0 i |^2 P_{ijk} = |\langle b_i b_j b_k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2$ ; *i*, *j*, *k* = 0,1, полученных в реальном эксперименте на 2- и 3-кубитовой моделях показаны на Рис.2 (g). Видно, что вероятность наблюдения правильного конечного состояния  $|0...0\rangle$  меньше 100% и для 2-и 3-кубитного эксперимента даются величинами 85,3 ± 0,4% и 49,1 ± 0,6%, соответственно. Значительное

отличие от идеального сценария обязано трём основным причинам: (i) конечному времени когерентности  $T_2$  кубитов, (ii) ошибкам гейтов СNOT и (iii) ошибкам считывания конечного состояния кубитового регистра.



Рис. 2. Схемы, реализующие разворот времени и результаты моделирования. (а) квантовая схема, реализующая операцию фазового сдвига состояния  $\hat{\Phi}_{k=6}$  для компоненты  $|0110\rangle$ . Схема включает в себя три типа гейтов: 1-кубит NOT гейт  $\hat{X}|b\rangle = |b \oplus 1\rangle$ , 2-кубит унитарного вращения  $\hat{T}(-2\varphi_k)[|0\rangle + a|1\rangle] = |0\rangle + ae^{-2i\varphi_k}|1\rangle$ , и 3-кубит гейт Тоффоли, который обращает состояние последнего целевого кубита, если и только если два первых кубиты находятся в  $|1\rangle$ :  $\hat{\Lambda}_2|11\rangle \otimes |b\rangle = |11\rangle \otimes |b \oplus 1\rangle$ . Первые три гейта Тоффоли устанавливают вспомогательный кубит  $c_2$  в  $|1\rangle$ , если и только если кубитовый регистр установлен в  $|0110\rangle$  состоянии и последние три логических элементов Тоффоли восстанавливают исходное состояние  $|b_0b_1b_2b_3 \otimes |000\rangle$ .

b) квантовая схема с оптимальным расположением гейтов Тоффоли, которые сопряжены с четырьмя компонентами:  $|1111\rangle$ ,  $|1110\rangle$ ,  $|1101\rangle$  и $|1100\rangle$ . Схема разбита на несколько вложенных блоков (подпрограмм)  $A_{11??} \supset A_{111?}$ , вопросительные знаки обозначают неизвестные битовые значения. Блок первого уровня (синий)  $A_{111?}$  сопряжен только с вычисленным состоянием, где все три старших кубита  $|b_0b_1b_2\rangle$  установлены в  $|1\rangle$ . Блок следующего уровня (красный)  $A_{11??}$  содержит в качестве подпрограммы блок  $A_{111?}$  и конъюгирует все компоненты  $|b_0b_1\rangle = |11\rangle$ .

(с) и (е) квантовые схемы, моделирующие процесс рассеяния одной или двух частиц (кубитые линии  $q_0$  и  $q_1$ ) на двухуровневой примеси (кубитовая линия  $q_2$ ). Унитарные операции  $\hat{U}_i$  (красные ящики) описывают свободную эволюцию TLI за время  $\tau$ . Остальные операции имитируют рассеяние частицы: группа 1-кубитовых вентилей (синих или желтых ящиков) в сочетании с двумя вентилями CNOT реализует оператор рассеяния  $\hat{S}_{\psi}$  для частицы  $q_1$  или  $q_0$ . Параметры гейтов адаптированы конкретным образом:  $\hat{T}_2|1\rangle \otimes \hat{U}_2 \hat{\sigma}_x \hat{U}_1 \sigma_x \wedge \hat{T}_1|q\rangle = |1\rangle \otimes \hat{S}_2 S_1^+|q\rangle$  и  $\hat{T}_2^+|1\rangle \otimes \hat{U}_2 \hat{U}_1 \hat{T}_1|q\rangle = |1\rangle \otimes |q\rangle$  (см. Приложение C). 2-и 3-кубитовые квантовые схемы, реализуют точную процедуру комплексного сопряжения. Единственный кубитовый гейт ТХТХ( $\varphi, \bar{\varphi}$ )  $\equiv \hat{T}(\varphi) \hat{\sigma}_x \hat{T}(\bar{\varphi}) \hat{\sigma}_x$  выполняет сдвиг фазы кубита компоненты: ТХТХ( $\varphi, \bar{\varphi}$ )( $a|0_i\rangle + b|1_i\rangle$ ) =  $ae^{i\bar{\varphi}}0_i + be^{i\varphi}|1_i\rangle$ ; i = 0,1,3. Гейт ТХТХ в сочетании с гейтом CNOT выполняет контроль фазовых сдвигов, связанных с однокубитовым ( $b_i, \bar{b}_i$ ; i = 0,1,2) (зеленые коробки), двухкубитовым ( $b_i \oplus b_j, \bar{b}_i \oplus \bar{b}_j$ ; i, j = 0; 1; 2, i < j) (голубая коробки) и трёхкубитовым ( $b_0 \oplus b_1 \oplus b2$ ,  $\overline{b_0 \oplus b_1 \oplus b2}$ ) логическими термами (красная коробка) в уравнении (2).

g) Осуществление 2- или 3-кубитового эксперимента по обращению времени, проведено на общедоступном квантовом компьютере IBM. Гистограмма показывает (в процентах) скорости появления вычислительных базисных состояний, полученных 8192 независимыми прогонами эксперимента.

Наблюдаемые вероятности результатов были получены после 8192 запусков каждого эксперимента в одном и том же состоянии 'ibmqx4' 5-кубитового квантового процессора (см. подробности в приложении F). Для 2-кубитного эксперимента были задействованы две кубитовые линии процессора  $q_1$  и  $q_2$  с временами когерентности  $41.0\mu s$  и  $43.5\mu s$  и погрешностями считывания  $\epsilon_{r1} = 3.3\%$  и  $\epsilon_{r2} = 2.9\%$ . Для 3-кубитового эксперимента использовалась дополнительная кубитовая линия  $q_0$  с  $T_2 = 39.4 \, \mu s$  и погрешностью считывания  $\epsilon_{r0} = 4.8\%$ . В 2-кубитовый эксперимент требует шесть  $\text{CNOT}_{q2,q1}$  гейтов с ошибкой  $\epsilon_{g21} = 2.786\%$ , в то время как 3-кубитовый эксперимент дополнительно, кроме того, шесть  $\text{CNOT}_{q2,q0}$  и четыре  $\text{CNOT}_{q1,q0}$  гейтов с соответствующими ошибками  $\epsilon_{g20} = 2.460\%$  и  $\epsilon_{g10} = 1.683\%$ .

Эти числа дают нам приблизительную оценку частоты ошибок для каждого эксперимента:

$$\epsilon_{2\text{bit}} = 1 - \left(1 - \epsilon_{g21}\right)^{6} (1 - \epsilon_{r1})(1 - \epsilon_{r2}) \approx 15.6\% \text{ and } \epsilon_{3\text{bit}} = 1 - (1 - \epsilon_{g21})^{6} (1 - \epsilon_{g20})^{6} (1 - \epsilon_{g10})^{4} (1 - \epsilon_{r0})(1 - \epsilon_{r1})(1 - \epsilon_{r2}) \approx 34.4\%.$$

Можно видеть, что, хотя эта оценка согласуется с наблюдаемой ошибкой 2-кубитового эксперимента, вероятность ошибки для 3-кубитового эксперимента недооценивается. Мы утверждаем, что длительность одного 3-кубитового эксперимента составляет около 7.5 $\mu$ s сравнима с  $T_2$ , а одиночный 2-кубит эксперимент занимает меньше  $3\mu$ s. Следовательно, эффекты декогеренции более заметны в 3-кубитном эксперименте, который может объяснить недооцененное значение 3-кубитового эксперимента по обращению времени. Более подробно экспериментальные данные для различных параметров системы и состояний процессора обсуждаются в приложении F.

### V. Выводы

Наши выводы открывают почву для исследований обращения времени и обратного потока времени в реальных квантовых системах. Одним из сложных направлений, которое следует преследовать, является временная зависимость сложности разворота  $\mathcal{N}$  развивающегося квантового состояния. В нашей работе мы показали, что изолированная d-мерная квантовая частица с квадратичным спектром демонстрирует полиномиальный рост сложности  $\mathcal{N}(\tau) = \tau^d$ . Раскрытие зависимости  $\mathcal{N}(\tau)$  для реалистичных ситуаций, учет взаимодействий установит механизм и соответствующий временной масштаб, на котором могут спонтанно возникать обращенные во времени состояния. Другой фундаментальный вопрос заключается в том, возможно ли вообще разработать квантовый алгоритм, который выполнял бы реверсирование времени более эффективно, чем использование  $\mathcal{O}(\mathcal{N})$  элементарных ворот? До сих пор наши схемы обращения времени прокручивались одна за другой через компоненты состояния, но не использовали квантовый параллелизм в полной мере.

*Выражение благодарности.* Работа выполнена при финансовой поддержке U.S. Department of Energy, Office of Science, Materials Sciences and Engineering Division (G.B.L., A.V.L., V.M.V.); RFBR Grants 17-02-00396A (G.B.L.) and 1802-00642A (A.V.L, G.B.L.); Pauli Center for Theoretical Studies at ETH Zurich (G.B.L.); Foundation for the Advancement of Theoretical Physics BASIS (G.B.L.); Swiss National Foundation through the NCCR QSIT (A.V.L.); Министерству образования и науки Российской Федерации 16.7162.2017/8.9 (A.V.L.); Правительству Российской Федерации в соответствии с соглашением 05.Y09.21.0018 (G.B.L., A.V.L.). Мы благодарим команду IBM-Q за предоставление нам доступа к их 5-кубитной платформе.

# Ссылки

1. S. Lloyd, On the spontaneous generation of complexity in the universe in Complexity and the Arrow of Time, ed. C. H. Lineweaver, P. C. W. Davies, and M. Ruse (Cambridge University Press, 2013).

2. W. Thomson, On the dynamical theory of heat. Part V. Thermo-electric currents, Trans. R. Soc. Edinb., 21, 123 (1857).

3. J. C. Maxwell, Illustrations of the dynamical theory of gases. Part I. On the motions and collisions of perfectly elastic spheres, Philos. Mag. 19, 1932 (1860).

4. L. Boltzmann, Weitere Studien u"ber das Wa"rmegleichgewicht unter Gasmoleku"len. Wien. Ber. 75, 62 (1872).

5. L. Boltzmann, Entgegnung auf die w¨arme-theoretischen Betrachtungen des Hrn. E. Zermelo. Annalen der Physik (Leipzig) 57, 773–784 (1896) [Translated and reprinted in S. G. Brush, Kinetic Theory 2 (Pergamon, 1966)].

6. J. L. Lebowitz, Statistical mechanics: A selective review of two central issues, Rev. Mod. Phys. 71, S346 (1999).

7. L. Landau, The damping problem in wave mechanics, Z. Phys. 45, 430 (1927).

8. J. von Neuman, Beweis des Ergodensatzes und des HTheorems in der neuen Mechanik, Z. Phys. 57, 30 (1929) [J. von Neumann, Proof of the ergodic theorem and the Htheorem in quantum mechanics, Eur. Phys. J. H 35, 201 (2010)].

9. E. Wigner, Ueber die Operation der Zeitumkehr in der Quantenmechanik, Nachr. Ges. Wiss. Go"ttingen, Math.Phys. Kl. 1932, 546 (1932).

10. A. T. Holster, The criterion for time symmetry of probabilistic theories and the reversibility of quantum mechanics, New J. Phys. 5, 130 (2013).

11. O. Oreshkov and N. J. Cerf, Operational formulation of time reversal in quantum theory, Nat. Phys. 11, 853 (2015).

12. A. V. Lebedev, G. B. Lesovik, and G. Blatter, N-particle scattering matrix for electrons Interacting on a quantum dot, Phys. Rev. Lett. 100, 226805 (2008).

13. S. Lloyd, Universal quantum simulators, Science 273, 1073 (1996).

14. A. Barenco, at al, Elementary gates for quantum computation, Phys. Rev. A 52, 3457 (1995).

15. G. B. Lesovik, On the law of increasing entropy and the cause of the dynamics irreversibility of quantum systems, J. Exp. Theor. Phys. 98, 184 (2013).

### Appendix A: Wave-packet reversal complexity

Let a charged particle have one dimensional wave function  $\psi(x) \equiv \sqrt{p(x)}e^{i\varphi(x)}$ . Consider a fluctuating electromagnetic field potential V(x,t) of the electromagnetic field which is approximated by the *N*-cell stepwise function  $V(x,t) = \sum_{n=1}^{N} I_n(x)V(x_n,t)$ , where  $I_n(x)$  is an indicator function of the cell with the index *n*. Let us assume that during the short time interval a relatively strong non-homogenous fluctuation has emerged and the wave packet  $\psi(x)$  acquires the coordinate dependent phase shift  $\psi(x) \to \tilde{\psi}(x) = \psi(x) \exp(i\sum_n I_n(x)\phi_n)$ , where  $\phi_n = \int dt \, eV(x_n,t)/\hbar$ . Consider then the specific fluctuation with  $\phi_n(x) = -2\varphi(x_n)$  which drives the original wave packet  $\psi(x)$  into its approximate complex conjugated form  $\tilde{\psi}^*(x)$ . The accuracy of such a conjugation procedure is defined through the overlap of the exact conjugated state  $\psi^*(x)$  with the approximate conjugated state  $\tilde{\psi}^*(x)$ ,  $S = \langle \psi^*(x) | \tilde{\psi}^*(x) \rangle$ ,

$$S = \sum_{n=1}^{\infty} \int dx \, I_n(x) p(x) \, e^{2i(\varphi(x) - \varphi(x_n))}. \tag{A1}$$

Then the probability of the correct reversion is given by  $|S|^2$ . Assuming that the particle density p(x) changes slowly on the scale of large fluctuations of the particle phase  $\varphi(x)$  one arrives at

$$|S|^2 \approx 1 - \frac{1}{3} \sum_{n=1}^{N} p(x_n) \delta x_n \left[ \varphi'(x_n) \delta x_n \right]^2,$$
 (A2)

for the sufficiently small  $\delta x_n$  of the cells defined through the condition  $g(x_n) \equiv \varphi'(x_n) \delta x_n \ll 1$ . Then the error probability  $\epsilon$  of the incorrect conjugation of the wavepacket is given by  $|S|^2 = 1 - \epsilon$  and in the continuous limit one has

$$\epsilon = \frac{1}{3} \int dx \, p(x) \, g^2(x). \tag{A3}$$

Let us now find the number of cells N needed to approximate the electromagnetic field complex conjugation procedure with a given error probability level  $\epsilon$ . From the definition  $g(x) = \varphi'(x)\delta x$  one has

$$N = \int dx \, \frac{|\varphi'(x)|}{g(x)}.\tag{A4}$$

Minimizing the functional N[g(x)] under the constraint Eq. (A3) one finds

$$N = \left(\frac{\lambda^3(\psi)}{3\epsilon}\right)^{1/2}, \quad \lambda(\psi) \equiv \int dx \left(|\psi(x)|^2 [\phi'(x)]^2\right)^{1/3}.$$
(A5)

Generalization of the above result to a d-dimensional case is straightforward

$$N_d = \lambda(\psi) \left(\frac{\lambda(\psi)}{3\epsilon}\right)^{d/2}, \quad \lambda(\psi) = \int d^d \vec{x} \left(|\psi(\vec{x})|^2 \vec{\nabla}^2 \varphi(\vec{x})\right)^{d/(d+2)}.$$
 (A6)

Applying these results to the wave packet given by the Eq. (1), one obtains  $\lambda(\Psi) \sim (\hbar \tau/m)^{2/3} \int dx (f^2(x)x^2)^{1/3}$ . We assume that initially at  $\tau = 0$  the wave packet has the size  $L_0$ , so that  $f^2(k) \sim L_0$  for  $|k| \leq 1/L_0$  and, therefore,  $\lambda(\Psi) \sim (L_\tau/L_0)^{2/3}$  where  $L_\tau = \hbar \tau/mL_0$  is the size of the wave packet after the free evolution during the time  $\tau$ . Therefore, the number of the elementary cells needed to arrange the electromagnetic potential fluctuation which reverses the dynamics of a one dimensional wave packet is linear in  $\tau$  since  $N \sim \epsilon^{-1/2} L_\tau/L_0$ , see also Ref. 15. For a *d*-dimensional wave packet the number of cells grows polynomially with  $\tau$  as  $N \sim \epsilon^{-d/2} (L_\tau/L_0)^d$ .

#### Appendix B: Reversal of the qubit register dynamics

Let the forward time dynamics of the *n*-qubit register state  $|\psi(t)\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} \psi_i(t)|i\rangle$  be governed by the Hamiltonian  $\hat{H}$ ,  $i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ . The time-reversal symmetry of the Schrödinger equation implies that if there is a forward

time solution  $|\psi(t)\rangle$  then the backward time solution  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ 

$$-i\hbar|\tilde{\psi}(t)
angle = \hat{H}|\tilde{\psi}(t)
angle$$
 (B1)

also exists and is uniquely defined through the forward time solution via the time-reversal operation  $\hat{R}$  such that  $|\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{R}|\psi(t)\rangle$ . The time-reversal operation  $\hat{R}$  is an anti-unitary operation:  $\langle \hat{R}\psi_1|\hat{R}\psi_2\rangle = \langle \psi_1|\psi_2\rangle^*$  and can be presented as a product  $\hat{R} = \hat{U}_R \hat{K}$  of some unitary operator  $\hat{U}_R$  and the complex conjugation operation  $\hat{K}$  which we define with respect to the computational basis  $|i\rangle$  of the qubit register as

$$\hat{K}\left(\sum_{i}\psi_{i}|i\rangle\right) = \sum_{i}\psi_{i}^{*}|i\rangle.$$
(B2)

Substituting  $|\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{U}_R \hat{K} |\psi(t)\rangle$  into Eq. (B1) one finds

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \left(\hat{U}_R^{\dagger} \hat{H} \hat{U}_R\right)^* |\psi(t)\rangle,\tag{B3}$$

and therefore the unitary operation  $\hat{U}_R$  has to satisfy a relation,

$$\hat{H} = \left(\hat{U}_R^{\dagger} \hat{H} \hat{U}_R\right)^*. \tag{B4}$$

The relation (B4) defines the unitary  $\hat{U}_R$ . Indeed, the hermitian operator  $\hat{H}$  can be represented in a form  $\hat{H} = \hat{U}_H^{\dagger} \hat{E} \hat{U}_H$ , where  $\hat{E}$  is a real diagonal operator and  $\hat{U}_H$  is unitary. Then it follows from the Eq. (B4)

$$\hat{U}_R = \hat{U}_H^\dagger \hat{U}_H^*. \tag{B5}$$

The forward time evolution operator  $\hat{U}(\tau) = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}$  applied to the time reversed state  $|\tilde{\psi}(\tau)\rangle$  drives it into the new state

$$\hat{U}(\tau)|\tilde{\psi}(\tau)\rangle = \hat{R}|\psi(0)\rangle. \tag{B6}$$

Indeed,

$$\begin{aligned} \hat{U}(\tau)|\tilde{\psi}(\tau)\rangle &\equiv e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} \,\hat{U}_R \,\hat{K} \, e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} \,|\psi(0)\rangle \\ &= e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} \, e^{i\hat{U}_R \hat{H}^* \hat{U}_R^\dagger \tau/\hbar} \,\hat{R} \,|\psi(0)\rangle. \end{aligned} \tag{B7}$$

Making use of the explicit form of the  $\hat{U}_R$  operator, see Eq. (B5), one has  $\hat{U}_R \hat{H}^t \hat{U}_R^\dagger = \hat{H}$  that proves Eq. (B6). Therefore, in order to restore the original state  $|\psi(0)\rangle$  from the time-evolved state  $|\psi(\tau)\rangle$  one has to apply the following sequence of operations

$$|\psi(0)\rangle = \hat{R}^{-1}\hat{U}(\tau)\hat{R}\,|\psi(\tau)\rangle.\tag{B8}$$

### Appendix C: Optimal phase shifts arrangement

Here we outline an optimal arrangement of the state selective phase shift operations  $\hat{\Phi}_i(\varphi) = |i\rangle\langle i|e^{i\varphi}$  entering the complex conjugation operation  $\hat{U}_{\psi} = \prod_{i=0}^{2^n-1} \hat{\Phi}_i(-2\varphi_i)$  for the qubit state  $|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{2^n-1} |\psi_i|e^{i\varphi_i}|i\rangle$ . Let us consider  $2^{k-2}$  operations  $\hat{\Phi}_k$  with index k having the same values of two highest bits  $b_0 = b_1 = 1$ :  $k(k') = 2^{n-1} + 2^{n-2} + k'$ ,  $k' = 0, \ldots, 2^{n-2} - 1$ . Then in the product  $\prod_{k'=0}^{2^{n-2}-1} \hat{\Phi}_k(-2\varphi_k)$  one needs to check the values of the bits  $b_0$  and  $b_1$  only once, and this reduces the number of Toffoli gates. This recipe can be recursively repeated for the next lower bits  $b_2$ ,  $b_3$  and so on, see Fig. 2(b). Then the resulting quantum circuit comprises the sequence of nested blocks or subroutines  $\mathcal{A}_{11b2\dots b_{n-1}} \supset \mathcal{A}_{111b3\dots b_{n-1}} \supset \ldots \supset \mathcal{A}_{1\dots 1b_{n-1}}$  where each subroutine  $\mathcal{A}_{1\dots 1b_m\dots b_{n-1}}$  performs the controlled phase shift on all components  $|k\rangle$  with first m highest bits equal to 1. As follows from the Fig. 2(b), the subroutine  $\mathcal{A}_{11\dots b_m\dots b_{n-1}}$  involves two subroutines of the next lower level  $\mathcal{A}_{11\dots 1b_m\dots b_{n-1}}$  and  $\mathcal{A}_{11\dots 0b_{m+1}\dots b_{n-1}}$ , and two additional Toffoli gates that are needed to check the value of the bit  $b_{m+1}$ . Therefore, the number of Toffoli gates  $N_{\Lambda_2}[\mathcal{A}_{11\dots 1b_m\dots b_{n-1}}] = 2 + 2N_{\Lambda_2}[\mathcal{A}_{11\dots 1b_{m+1}\dots b_{n-1}}]$  with the boundary condition  $N_{\Lambda_2}[\mathcal{A}_{11\dots 1b_{m-1}}] = 2$ , that

#### Appendix D: Boolean function time-reversal algorithm

Here we describe the time-reversal procedure of a qubit register based on the arithmetic representation of a n-qubit Boolean function,

$$b_{n-1} \wedge b_{n-2} \wedge \ldots \wedge b_0 = \begin{cases} 1, \ b_0 = b_1 = \ldots = b_{n-1} = 1, \\ 0, \ \text{overwise.} \end{cases}$$
(D1)

We find the minimal number of CNOT gates needed for the implementation of this procedure. Let us start with the two-qubit situation where one wishes to reverse the general two-qubit state  $|\psi_2\rangle = e^{i\varphi_{00}}|00\rangle + e^{i\varphi_{01}}|01\rangle + e^{i\varphi_{10}}|10\rangle + e^{i\varphi_{11}}|11\rangle$ . This requires to implement the complex conjugation procedure, which for a given state can be realized by the two-qubit unitary operation

$$\hat{K}_2 = \sum_{b_0, b_1 = 0, 1} e^{-2i\varphi_{b_1 b_0}} |b_1 b_0\rangle \langle b_1 b_0| \equiv e^{-2i\hat{F}(b_1, b_0)},$$
(D2)

where  $\hat{F}(b_1, b_0)$  is the two-qubit Boolean function of the form

$$\hat{F}(b_1, b_0) = \varphi_{00} \,\bar{b}_1 \wedge \bar{b}_0 + \varphi_{10} \,b_1 \wedge \bar{b}_0 + \varphi_{01} \,\bar{b}_1 \wedge b_0 + \varphi_{11} \,b_1 \wedge b_0,\tag{D3}$$

and  $\bar{b}_i$  denotes the logical negation of the bit  $b_i$ ,  $\bar{b}_i = \text{NOT}(b_i)$ . Making use of the arithmetic representation of  $b_1 \wedge b_0$ , see Eq. (2), one finds

$$\hat{F}(b_1, b_0) = \frac{\varphi_{01} + \varphi_{11}}{2} b_0 + \frac{\varphi_{10} + \varphi_{00}}{2} \bar{b}_0 + \frac{\varphi_{10} + \varphi_{11}}{2} b_1 + \frac{\varphi_{01} + \varphi_{10}}{2} \bar{b}_1 - \frac{\varphi_{00} + \varphi_{11}}{2} b_1 \oplus b_0 - \frac{\varphi_{10} + \varphi_{01}}{2} \bar{b}_1 \oplus b_0, \quad (D4)$$

where  $b_1 \oplus b_0$  denotes a bit summation by modulo 2,

$$b_1 \oplus b_0 = \begin{cases} 0, \ b_0 = b_1, \\ 1, \ b_0 \neq b_1. \end{cases}$$
(D5)

The first four terms in the Eq. (D4) correspond to the one-qubit state dependent phase shifts and can be realized only via the single-qubit gates

$$\hat{T}(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix}, \quad \hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$
(D6)

available on the public IBM quantum computer. The last two-qubit terms in Eq. (D4) will require two-qubit CNOT gates. The overall quantum circuit which realizes the unitary operation  $e^{-2i\hat{F}(b_1,b_0)}$  is described by the following sequence of unitary operations

$$e^{-2iF(b_{1},b_{0})} = \text{CNOT}_{0,1} \cdot \left[\text{TXTX}_{1}(\varphi_{00} + \varphi_{11},\varphi_{10} + \varphi_{01}) \otimes \mathbf{1}_{0}\right] \cdot \text{CNOT}_{0,1} \\ \cdot \left[\text{TXTX}_{1}(-\varphi_{10} - \varphi_{11}, -\varphi_{00} - \varphi_{01}) \otimes \text{TXTX}_{0}(-\varphi_{01} - \varphi_{11}, -\varphi_{10} - \varphi_{00})\right], \quad (D7)$$

where  $\text{TXTX}_i(\varphi, \bar{\varphi}) \equiv \hat{T}_i(\varphi) \hat{X}_i \hat{T}_i(\bar{\varphi}) \hat{X}_i$  is a single-qubit unitary operation which adds specified phase shifts to the state components of the *i*th qubit:  $\text{TXTX}_i(\varphi, \bar{\varphi})(a|0_i\rangle + b|1_i\rangle) = ae^{i\bar{\varphi}}|0_i\rangle + be^{i\varphi}|1_i\rangle$ . The corresponding quantum circuit is shown in the Fig. 2(d) and involves only two  $\text{CNOT}_{0,1}$  gates, where  $|b_0\rangle$  qubit serves as control bit and  $|b_1\rangle$  as a target.

The above two-qubit complex conjugation procedure can be further extended onto a general *n*-qubit state. As follows from the Eq. (2), the quantum circuit performing complex conjugation of a given *n*-qubit state requires  $\binom{n}{2}$ 



Figure 3. The quantum circuit which implements the four-qubit quantum gate  $CTXTX_{0123}$ . One can check that for any computational basis state  $|b_3b_2b_1b_0\rangle$  the state of the elder bit  $b_3$  is given by  $b_0 \oplus b_1 \oplus b_2 \oplus b_3$  right after the first ladder CNOT gates. The remaining symmetric half of CNOT gates is required in order to restore the original quantum state of the qubit register.

two-qubit operations,

$$CTXTX_{i_1 i_2}(\varphi, \bar{\varphi}) \equiv \begin{cases} \hat{T}_{i_2}(\varphi), & b_{i_1} \oplus b_{i_2} = 1\\ \hat{T}_{i_2}(\bar{\varphi}), & b_{i_1} \oplus b_{i_2} = 0 \end{cases}, \quad 1 \le i_1 < i_2 \le n,$$
(D8)

 $\binom{n}{3}$  three-qubit operations,

$$\operatorname{CTXTX}_{i_1 i_2 i_3}(\varphi, \bar{\varphi}) \equiv \begin{cases} \hat{T}_{i_3}(\varphi), & b_{i_1} \oplus b_{i_2} \oplus b_{i_3} = 1\\ \hat{T}_{i_3}(\bar{\varphi}), & b_{i_1} \oplus b_{i_2} \oplus b_{i_3} = 0 \end{cases}, \quad 1 \le i_1 < i_2 \le i_3 \le n,$$
(D9)

and so on. The general *n*-qubit operation  $\text{CTXTX}_{i_1...i_n}(\varphi, \overline{\varphi}), 1 \leq i_1 < i_2 < \ldots < i_n$  is implemented with the help of 2(n-1) CNOT gates as shown on the Fig. 3. Therefore, one might conclude that in total  $2\sum_{k=2}^{n}(k-1)\binom{n}{k} = 2^n(n-2) + 2$  CNOT gates are required in order to implement a *n*-qubit time-reversal procedure.

However, the number of the CNOT gates can be reduced as far as some of operators  $\text{CTXTX}_{i_1i_2...}$  can be grouped together. Consider, for example, the unitary operation  $\text{CTXTX}_{12} \cdot \text{CTXTX}_{123}$ . Its straightforward implementation requires 4+2 CNOT gates. A more savvy arrangement is shown in the Fig. 2(f). There the computational state of the second qubit  $b_1$  right after the first  $\text{CNOT}_{0,1}$  gate is given by  $b_1 \oplus b_2$ . This enables one to implement the controlled phase shift  $\text{CXTXT}_{01}$  right after the first  $\text{CNOT}_{0,1}$  operation. At this moment, one need not to restore the original bit values  $b_0$  and  $b_1$  but rather to add the second  $\text{CNOT}_{1,2}$ , set the third qubit  $b_3$  into the state  $b_0 \oplus b_1 \oplus b_2$ , and to implement the controlled phase shift  $\text{CTXTX}_{012}$ . Hence the unitary operation  $\text{CTXTX}_{01} \cdot \text{CTXTX}_{012}$  will require the same number of CNOT gates as the operation  $\text{CTXTX}_{012}$  alone. As a result, the complex conjugation operation of a given 3-qubit state can be implemented using only 8 CNOT gates as shown in Fig. 2(f).

The above CNOT optimization technique can be easily generalized to a *n*-qubit case. Consider a product  $\operatorname{CTXTX}_{i_1i_2} \cdot \operatorname{CTXTX}_{i_1i_2i_3} \cdot \operatorname{CTXTX}_{i_1i_2i_3i_4} \cdots \cdot \operatorname{CTXTX}_{i_1i_2i_3i_4\dots i_n}$  where a sequence of nested strings of the qubit indices  $i_1i_2 \subset i_1i_2i_3 \subset \cdots \subset i_1i_2i_3i_4 \cdots i_n$  are formed by adding an additional index to the right hand side of a previous string. Then the implementation of this product requires the same number of CNOT gates as the largest  $\operatorname{CTXTX}_{i_1i_2i_3i_4\dots i_n}$  factor of the product. This observation lets us find a number of CNOT gates  $N_{\oplus}[\hat{K}_n]$  needed to implement the complex conjugation unitary operation  $\hat{K}_n$  of a given *n*-qubit state.

Let us assume that  $N_{\oplus}[\hat{K}_{n-1}]$  for a n-1 qubit register  $b_1 \dots b_{n-1}$  is known. Let us add an additional qubit line  $b_0$ and find how many additional operations  $\operatorname{CTXTX}(i_1i_2\dots)$  one needs in order to complete the complex conjugation task for *n*-qubit register  $b_0 \dots b_{n-1}$ . Obviously any such additional operation  $\operatorname{CTXTX}_s$  has its parameter string  $s = i_1 \dots i_k$  starting from the index 0, i.e.  $i_1 = 0$ . Consider for example n = 4 case. Then there are seven additional operations,

$$CTXTX_{0123} \cdot CTXTX_{012} \cdot CTXT_{013} \cdot CTXTX_{02} \cdot CTXTX_{01} \cdot CTXTX_{02} \cdot CTXTX_{03}. \tag{D10}$$

Making an optimization procedure one can group these operations as

$$(CTXTX_{01} \cdot CTXTX_{012} \cdot CTXTX_{0123}) \cdot (CTXTX_{02} \cdot CTXTX_{023}) \cdot CTXTX_{013} \cdot CTXTX_{03},$$
(D11)

and hence

$$N_{\oplus}[\hat{K}_{4}] = N_{\oplus}[\text{CTXTX}_{0123}] + N_{\oplus}[\text{CTXTX}_{023}] + N_{\oplus}[\text{CTXTX}_{013}] + N_{\oplus}[\text{CTXTX}_{03}] + N_{\oplus}[\hat{K}_{3}], \tag{D12}$$

where  $N_{\oplus}[\text{CTXTX}_s]$  is the number of CNOT gates needed for the operation  $\text{CTXTX}_s$ . One can note, that only generalized operations  $\text{CTXTX}_s$  with the inputs strings  $s = i_1 \dots i_k$  where first and last indices are equal to 0 and 3, respectively are counted for the total number of the CNOT gates. Therefore, for a general case, the following relation

holds

$$N_{\oplus}[\hat{K}_{n}] = N_{\oplus}[\hat{K}_{n-1}] + N_{\oplus}[\text{CTXTX}_{1n}] + \sum_{1 < k_{1} < n} N_{\oplus}[\text{CTXTX}_{1k_{1}n}] + \sum_{1 < k_{1} < k_{2} < n} N_{\oplus}[\text{CTXTX}_{1k_{1}k_{2}n}] + \dots + N_{\oplus}[\text{CTXTX}_{1\dots n}]$$
$$= N_{\oplus}[\hat{K}_{n-1}] + \sum_{k=0}^{n-2} 2(k+1)\binom{n-2}{k} = N_{\oplus}[\hat{K}_{n-1}] + n2^{n-2},$$
(D13)

and, therefore,

$$N_{\oplus}[\hat{K}_n] = (n-1)2^{n-1}, \quad n > 1.$$
 (D14)

#### Appendix E: Simulation of scattering on a two-level impurity

Here we discuss a spinless particle which scatters on a two-level impurity (TLI). The free dynamics of the TLI is governed by a Hamiltonian

$$\hat{H}_{i} = \hbar\omega (\cos\alpha\,\hat{\sigma}_{z} + \sin\alpha\,\hat{\sigma}_{x}). \tag{E1}$$

The scattering process is described by the 2 × 2 scattering matrix  $\hat{S}_i$ , i = 0, 1 whose form depends on the impurity state. The quantum state of the particle-impurity system can be described as the two-bit state  $|\psi\rangle = \sum_{b_0,b_1=0,1} A_{b_1b_0}|b_1\rangle \otimes |b_0\rangle$  where the first qubit describes the TLI and the second one describes the propagation direction of an incoming/scattered particle. Let the system start in the state  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |L\rangle$  with the particle coming from the left. Let after the time  $\tau > 0$  the particle be scattered on the TLI. The resulting state  $|\psi(\tau)\rangle$  is generated by the sequence of unitary operations  $|\psi(\tau)\rangle = \hat{S}_{\psi} \cdot [\hat{U}_i(\tau) \otimes \mathbf{1}]|\psi(0)\rangle$ , where the unitary operator  $\hat{U}_i(\tau) \equiv e^{-i\hat{H}_i\tau/\hbar}$  describes the free evolution of TLI and

$$\hat{S}_{\psi} = |0\rangle \langle 0| \otimes \hat{S}_{0} + |1\rangle \langle 1| \otimes \hat{S}_{1}$$
(E2)

describes the state dependent scattering process of the incoming particle. The unitary operator  $\hat{U}_{i}(\tau) = e^{-i\omega\tau(\cos\alpha\,\hat{\sigma}_{x}+\sin\alpha\,\hat{\sigma}_{z})}$  is symmetric. In the absence of the magnetic field, the scattering operator  $\hat{S}_{\psi}$  is symmetric as well. Let the state freely evolve after the scattering at the  $t = \tau$  during the same time period  $\tau$ . Then the resulting state  $|\psi(2\tau)\rangle = [\hat{U}_{i}(\tau) \otimes \mathbf{1}]|\psi(\tau)\rangle$  can be generated from the initial state  $|\psi(0)\rangle$  by the symmetric 2-qubit unitary operator

$$\hat{U}_{2\text{bit}} = \begin{bmatrix} \hat{U}_{i}(\tau) \otimes \mathbf{1} \end{bmatrix} \cdot \hat{S}_{\psi} \cdot \begin{bmatrix} \hat{U}_{i}(\tau) \otimes \mathbf{1} \end{bmatrix}.$$
(E3)

Therefore, as we have already discussed in Appendix B, the time reversal procedure of the 2-qubit state  $|\psi(2\tau)\rangle$  requires only the unitary implementation of the complex conjugation operation  $|\psi(2\tau)\rangle \rightarrow |\psi^*(2\tau)\rangle$ .

Our goal is to implement the unitary operation  $\hat{U}_{2\text{bit}}$  via the set of quantum gates available on the IBM public quantum computer. The only available two-qubit gate is the  $\text{CNOT}_{b_c,b_t}$  gate, where  $b_c$  the qubit serves as a control and  $b_t$  qubit serves a target. Among the standard 1-qubit gates we will need two available generalized 1-qubit gates: the relative phase shift gate  $\hat{T}(\alpha)$ , introduced in the Appendix D and the full 1-qubit unitary rotation

$$\hat{U}_3(\theta, \alpha, \beta) \equiv \hat{T}(\alpha) \cdot \hat{R}(\theta) \cdot \hat{T}(\beta), \tag{E4}$$

where

$$\hat{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \frac{\theta}{\sin\frac{\theta}{2}} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$
(E5)

Any 2 × 2 unitary matrix  $\hat{U}$  can be represented in the form (E4) up to some phase factor:  $\hat{U} = e^{i\delta}\hat{U}_3(\theta,\alpha,\beta)$ . In particular, any symmetric 2 × 2 unitary matrix  $\hat{U} = \hat{U}^t$  has the form  $e^{i\delta}\hat{U}_3(\theta,\alpha,\alpha+\pi)$ . Therefore, a given set of

$$\hat{U}_{i}(\tau) = e^{i\delta}\hat{U}_{3}(\xi,\eta,\eta+\pi),\tag{E6}$$

$$\hat{S}_i = e^{i\delta_i} \hat{U}_3(\theta_i, \varphi_i, \varphi_i + \pi), \quad i = 0, 1.$$
(E7)

The phase exponent  $e^{i\phi}$  gives only a trivial common phase factor for the system state and will be omitted in what follows. Without any loss of generality we assume  $\delta_0 = 0$  as well.

Next, let us construct the 2-qubit operation  $\hat{S}_{\psi}$  using as less CNOT gates as possible. It turns out that  $\hat{S}_{\psi}$  can be constructed with the help of only two CNOT gates. Indeed,

$$\hat{S}_{\psi} = \left(|1\rangle\langle 1|\otimes\hat{S}_{1}\hat{S}_{0}^{\dagger} + |0\rangle\langle 0|\otimes \mathbf{1}\right) \cdot \left[\mathbf{1}\otimes\hat{S}_{0}\right] \equiv \Lambda_{b_{1},b_{0}}(\hat{S}_{1}\hat{S}_{0}^{\dagger}) \cdot \left[\mathbf{1}\otimes\hat{S}_{0}\right],\tag{E8}$$

where  $\Lambda_{b_1,b_0}(\hat{W})$  is a controlled  $\hat{W}$ -gate,

$$\Lambda_{b_c,b_t}(\hat{W})(|b_c\rangle \otimes |b_t\rangle) = \begin{cases} |b_c\rangle \otimes \hat{W}|b_t\rangle, & b_1 = 1, \\ |b_c\rangle \otimes |b_t\rangle, & b_1 = 0. \end{cases}$$
(E9)

The unitary matrix  $\hat{W} = \hat{S}_1 \hat{S}_0^{\dagger} \equiv e^{i\delta} \hat{U}_3(\theta, \alpha, \beta)$  can be represented as,

$$\hat{W} = e^{i\delta + i(\alpha + \beta)/2} \hat{T}(\alpha) \hat{R}\left(\frac{\theta}{2}\right) \hat{\sigma}_x \hat{R}\left(-\frac{\theta}{2}\right) \hat{T}\left(-\frac{\alpha + \beta}{2}\right) \hat{\sigma}_x \hat{T}\left(\frac{\beta - \alpha}{2}\right).$$
(E10)

The advantage of the latter representation is that if one replaces in the Eq. (E10) two Pauli matrices  $\hat{\sigma}_x$  by the identity operator, one gets a phase shift  $e^{i\delta+i(\alpha+\beta)/2}$  only. Therefore,

$$\Lambda_{b_1,b_0}(\hat{W}) = \left[\hat{T}\left(\delta + \frac{\alpha + \beta}{2}\right) \otimes \hat{U}_3\left(\frac{\theta}{2}, \alpha, 0\right)\right] \cdot \text{CNOT}_{b_1,b_0} \cdot \left[\mathbf{1} \otimes \hat{U}_3\left(-\frac{\theta}{2}, 0, -\frac{\alpha + \beta}{2}\right)\right] \cdot \text{CNOT}_{b_1,b_0} \cdot \left[\mathbf{1} \otimes \hat{T}\left(\frac{\beta - \alpha}{2}\right)\right], \text{ (E11)}$$

and the whole evolution operator, see Eq. (E3) can be presented as,

$$\hat{U}_{2\text{bit}} = \left[\hat{U}_3(\xi,\eta,\eta+\pi) \otimes \mathbf{1}\right] \cdot \Lambda_{b_1,b_0}(\hat{S}_1 \hat{S}_0^{\dagger}) \cdot \left[\hat{U}_3(\xi,\eta,\eta+\pi) \otimes \hat{U}_3(\theta_0,\varphi_0,\varphi_0+\pi)\right].$$
(E12)

The corresponding 2-qubit quantum circuit is shown on a Fig. 2(c).

Similarly, we consider a 3-qubit model describing the scattering of two particles on a TLI. We assume that particles arrive to the TLI with the time separation  $\tau$ ,

$$\hat{U}_{3\text{bit}} = \begin{bmatrix} \hat{U}_{i}(\tau) \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |0\rangle \langle 0| \otimes \mathbf{1} \otimes \hat{S}_{0} + |1\rangle \langle 1| \otimes \mathbf{1} \otimes \hat{S}_{1} \end{bmatrix} \\
\cdot \begin{bmatrix} \hat{U}_{i}(\tau) \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |0\rangle \langle 0| \otimes \hat{S}_{0} \otimes \mathbf{1} + |1\rangle \langle 1| \otimes \hat{S}_{1} \otimes \mathbf{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{U}_{i}(\tau) \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \end{bmatrix}, \quad \text{(E13)}$$

where the first (eldest) bit describes the state of the TLI and the second and third qubits describe the scattering state of the first and second particles correspondingly. The quantum circuit which implements the evolution operator  $\hat{U}_{3\text{bit}}$ is shown in the Fig. 2(e).

#### Appendix F: Time-reversal experiment

In the simulation experiment we choose fixed scattering matrices of the two-level impurity (TLI),

$$\hat{S}_{0} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_{1} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}e^{i\pi/3} \\ \frac{1}{2}e^{i\pi/3} & -\frac{\sqrt{3}}{2}e^{2\pi i/3} \end{bmatrix}, \quad (F1)$$

$$\hat{S}_{\psi} \approx \left[ \mathbf{1} \otimes \hat{U}_{3}(0.723, -1.27) \right] \cdot \text{CNOT}_{1,2} \cdot \left[ \hat{T}(1.047) \otimes \hat{U}_{3}(-0.723, 0, -0.523) \right] \\ \cdot \text{CNOT}_{1,2} \left[ \mathbf{1} \otimes \hat{T}(1.761) \right] \cdot \left[ \mathbf{1} \otimes \hat{U}_{3}\left(\frac{2\pi}{3}, 0, \pi\right) \right], \quad (F2)$$

where the first (control) qubit describes a state of TLI and the second (target) qubit describes a scattering state of the particle,  $\hat{U}_3(\alpha, \varphi, \lambda)$  and  $\hat{T}(\varphi)$  are generalized one-qubit gates available on the IBM quantum computer.

The free evolution operator  $\hat{U}_{i}(\tau) = e^{-i\hat{H}_{i}\tau/\hbar}$  with  $\hat{H}_{i} = \hbar\omega(\cos\alpha\,\hat{\sigma}_{z} + \sin\alpha\,\hat{\sigma}_{x})$  is parameterized by two parameters  $\omega\tau$  and  $\alpha$ . The unitary operator  $\hat{U}_{i}(\tau)$  is symmetric and for a fixed values of  $\omega\tau$  and  $\alpha$  can be presented in the form,

$$\hat{U}_{i}(\tau) = e^{i\delta}\hat{U}_{3}(\xi,\eta,\eta+\pi), \quad \xi = \xi(\omega\tau,\alpha), \quad \eta = \eta(\omega\tau,\alpha),$$
(F3)

where  $e^{i\delta}$  some phase factor which changes only an overall phase of the qubit register;  $\xi$  and  $\eta$  are parameters which uniquely defined by  $\omega\tau$  and  $\alpha$ . In the following we choose  $\omega\tau = \pi/6$  and vary the parameter  $\alpha$  among four values  $\pi/6$ ,  $\pi/4$ ,  $\pi/3$  and  $\pi/2$  with the corresponding gate parameters,

$$\begin{split} &\xi\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{6}\right)\approx 0.505, \qquad \eta\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{6}\right)\approx -1.107, \\ &\xi\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{4}\right)\approx 0.723, \qquad \eta\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{4}\right)\approx -1.183, \\ &\xi\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{3}\right)\approx 0.896, \qquad \eta\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{3}\right)\approx -1.290, \\ &\xi\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{2}\right)\approx 1.047, \qquad \eta\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{2}\right)\approx -\pi/2. \end{split}$$

Table I. The occurrence rates of the computational basis states for 2-qubit experiments.

| $\omega \tau$ | α       | $ 00\rangle$ | $ 10\rangle$ | $ 01\rangle$ | $ 11\rangle$ | F              |
|---------------|---------|--------------|--------------|--------------|--------------|----------------|
| $\pi/6$       | $\pi/6$ | 6949         | 437          | 562          | 244          | $84.8\pm0.4\%$ |
| $\pi/6$       | $\pi/4$ | 6916         | 440          | 576          | 260          | $84.4\pm0.4\%$ |
| $\pi/6$       | $\pi/3$ | 6983         | 370          | 560          | 279          | $85.2\pm0.4\%$ |
| $\pi/6$       | $\pi/2$ | 6950         | 338          | 551          | 353          | $84.8\pm0.4\%$ |

Table II. The occurrence rates of the computational basis states for 3-qubit experiments.

| $\omega \tau$ | $\alpha$ | $ 000\rangle$ | $ 001\rangle$ | $ 010\rangle$ | $ 011\rangle$ | $ 100\rangle$ | $ 101\rangle$ | $ 110\rangle$ | $ 111\rangle$ | F              |
|---------------|----------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------------|
| $\pi/6$       | $\pi/6$  | 3909          | 1380          | 1069          | 487           | 482           | 309           | 332           | 224           | $47.7\pm0.5\%$ |
| $\pi/6$       | $\pi/4$  | 3934          | 1157          | 981           | 380           | 618           | 360           | 407           | 355           | $48.0\pm0.5\%$ |
| $\pi/6$       | $\pi/3$  | 3957          | 832           | 884           | 327           | 859           | 359           | 531           | 443           | $48.3\pm0.5\%$ |
| $\pi/6$       | $\pi/2$  | 3879          | 355           | 1050          | 425           | 964           | 418           | 630           | 471           | $47.3\pm0.5\%$ |

Table III. Relaxation times  $T_1$ , coherence times  $T_2$ , readout errors  $\epsilon_r$  and one-qubit gate errors  $\epsilon_1$  for each qubit line.

| $q_n$ | $T_1(\mu s)$ | $T_2(\mu s)$ | $\epsilon_r(\%)$ | $\epsilon_1(\%)$ |
|-------|--------------|--------------|------------------|------------------|
| $q_0$ | 52.4         | 47.3         | 4.2              | 0.077            |
| $q_1$ | 58.0         | 40.6         | 3.6              | 0.103            |
| $q_2$ | 46.9         | 47.4         | 2.8              | 0.137            |

The occurrence rates of the computational basis states for 2-qubit and 3-qubit experiments are shown in Tables I and II for the different input parameters of the model. The 2-qubit experiment used  $q_1$  and  $q_2$  qubit lines of the

'ibmqx4' five qubit quantum processor. The 3-qubit experiment used in addition a  $q_0$  qubit line. In both experiments the  $q_2$  qubit line has modeled a state of TLI. The calibration state of the quantum computer was the same for all experiments. The qubit's relaxation times  $T_1$ , coherence times  $T_2$ , readout errors  $\epsilon_r$  and one-qubit gate errors  $\epsilon_1$  for each qubit line are shown in the Table III. The errors of the CNOT gates  $\text{CNOT}_{q2,q0}$ ,  $\text{CNOT}_{q2,q1}$  and  $\text{CNOT}_{q1,q0}$  used in the experiments are  $\epsilon_{g20} = 1.91\%$ ,  $\epsilon_{g21} = 2.68\%$  and  $\epsilon_{g10} = 1.70\%$  respectively. These processor's state parameters allows us to estimate a theoretical value of a time-reversal fidelity  $F = |\langle 0 \dots 0 | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2$ , where  $|\tilde{\psi}_0\rangle$  is a final state of the qubit register. For the used gate arrangement one has,

$$F_{2\text{bir}}^{\text{theor}} = (1 - \epsilon_{g21})^6 (1 - \epsilon_{r1}) (1 - \epsilon_{r2}) \approx 79.6\%, \tag{F4}$$

$$F_{3bit}^{\text{theor}} = (1 - \epsilon_{g21})^6 (1 - \epsilon_{g20})^6 (1 - \epsilon_{g10})^4 (1 - \epsilon_{r0}) (1 - \epsilon_{r1}) (1 - \epsilon_{r2}) \approx 63.4\%,$$
(F5)

while the experimentally observed values of the time-reversal fidelity are shown in Tables I and II.