

Избирательное управление состояниями трехуровневого квадрупольного ядра с помощью неселективных радиочастотных импульсов

В. Е. Зобов, В. П. Шауро*

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отд. РАН, 660036 Красноярск, Россия

* Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 13 июня 2007 г.

Для квадрупольных ядер предложена схема получения составного оператора селективного поворота из неселективных радиочастотных (РЧ) импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции. Показано на примере трех уровней, что точность поворота таким оператором сопоставима с точностью простого селективного РЧ импульса, но осуществляется за более короткое время.

PACS: 03.67.Lx

Введение. В последнее время в качестве элементной базы квантового компьютера наряду с двухуровневыми системами (кубитами) [1] обсуждаются d-уровневые квантовые системы (кудиты) [2–9], которые чаще встречаются в природе. К ним относятся ядра со спином $I > 1/2$ в сильном магнитном поле, взаимодействие квадрупольных моментов которых с градиентом кристаллического поля приводит к образованию $2I + 1$ неэквидистантных уровней [2–5]. Состоянием такого ядра можно управлять с помощью импульсов радиочастотного (РЧ) магнитного поля, поэтому такие системы оказываются удобным объектом для изучения закономерностей квантовых вычислений на кудитах.

Для осуществления квантовых вычислений необходимы селективные переходы между определенными уровнями. По техническим причинам эксперименты ведутся на жидких кристаллах [3–5], у которых градиент кристаллического поля имеет небольшую величину, что приводит к малой величине разности частот переходов между различными уровнями. По этой причине длительность селективных РЧ импульсов возрастает и становится сравнимой со временем спин-решеточной релаксации (декогерентизации). Для систем из двух спинов $I = 1/2$ с близкими ларморовскими частотами был разработан способ (см., например, [10]) для осуществления селективных поворотов с помощью последовательности коротких неселективных РЧ импульсов, разделенных интервалом свободной эволюции. Этот способ не годится для неэквидистантных уровней одного спина, обусловленных квадрупольным взаимодействием, квадратичным по операторам спиновых проекций. Для них в настоящей работе мы предлагаем свой способ,

основанный на методе эффективного гамильтониана, и демонстрируем его работу на примере трех уровней ядра с $I = 1$.

Ядерный спин в магнитном поле. Гамильтониан ядра со спином $I = 1$ в сильном магнитном поле B_0 имеет вид [11]

$$H_0 = -\omega_0 I_z + H_q, \quad H_q = q \left(I_z^2 - \frac{2}{3} \right), \quad (1)$$

где $\omega_0 = \gamma B_0$ – ларморовская частота прецессии спина, q – константа взаимодействия квадрупольного момента ядра с градиентом кристаллического поля, I_z – оператор проекции спина на направление внешнего постоянного поля (ось Z). Энергию будем измерять в частотных единицах и полагать $\hbar = 1$. Квадрупольное взаимодействие H_q приводит к образованию трех неэквидистантных уровней с различными значениями I_z :

$$|I_z = 1\rangle = |0\rangle; \quad |I_z = 0\rangle = |1\rangle; \quad |I_z = -1\rangle = |2\rangle. \quad (2)$$

Их мы выберем в качестве базисных состояний кутрита.

РЧ импульс получаем при включении РЧ поля с амплитудой B_1 и частотой ω в течение конечного времени $t_r \gg 1/\omega$. Во вращающейся с частотой ω системе координат (ВСК) [11] изменение состояния во времени задается оператором эволюции (3)

$$U(t) = e^{-iHt} \quad (3)$$

с не зависящим от времени эффективным гамильтонианом H :

$$H = H_q + (\omega - \omega_0) I_z - \frac{1}{2} \Omega (e^{-i\varphi} I^- + e^{i\varphi} I^+). \quad (4)$$

Здесь $I^\pm = I_x \pm iI_y$ – повышающий и понижающий операторы, $\Omega = \gamma B_1$. Фаза РЧ поля φ определяет направление поля в ВСК. При $\varphi = \pi$ ($\varphi = 0$) поле направлено вдоль оси X ($-X$), при $\varphi = \pi/2$ ($\varphi = -\pi/2$) поле направлено вдоль оси Y ($-Y$).

Селективный поворот с помощью селективных импульсов. Изменение состояния кутрита осуществляется действием унитарных операторов, представленных матрицами 3×3 в базисе (2). Определим оператор селективного поворота вокруг оси между состояниями $m-n$ кутрита следующим образом:

$$R_\alpha^{m-n}(\theta) = e^{-i\theta B_\alpha^{m-n}}, \quad \alpha = x, y, \quad (5)$$

где

$$B_x^{0-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad B_x^{1-2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (6)$$

$$B_y^{0-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad B_y^{1-2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix};$$

Например, матрица поворота вокруг оси Y между уровнями 1–2 имеет вид

$$R_y^{1-2}(\theta) = e^{-i\theta B_y^{1-2}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}.$$

Действие отдельного РЧ импульса определяется оператором эволюции (3) с гамильтонианом (4). Для получения оператора селективного поворота (5) между состояниями $m-n$, надо выбрать частоту РЧ поля, равной частоте переходов между соответствующими уровнями энергии:

$$\omega^{0-1} = \omega_0 - q; \quad \omega^{1-2} = \omega_0 + q, \quad (7)$$

и длительность импульса

$$t_r = \theta / \sqrt{2}\Omega. \quad (8)$$

При этом необходимо, чтобы амплитуда поля была много меньше разницы между резонансными частотами различных переходов ($\Omega \ll q$).

На практике [4] используются селективные импульсы не прямоугольной формы, а гауссовой:

$$\Omega(t) = \Omega \exp\{-g^2(2t/t_g - 1)^2\}, \quad (9)$$

где t_g – длительность импульса, g – граничное значение показателя. Например, для $g = 1.5$, $\exp\{-g^2\} = 0.105$

$$t_g = 1.752 \frac{\theta}{\sqrt{2}\Omega}. \quad (10)$$

Для получения гауссового импульса составляют пакет из узких прямоугольных импульсов, амплитуда которых изменяется по указанному закону (9).

Одновременно с резонансными переходами происходят нерезонансные переходы между уровнем с энергией $2q$ и двумя остальными уровнями с близкими энергиями $\pm\Omega/\sqrt{2}$ (мы отбрасываем у H_q в (3) слагаемое $-2q/3$, приводящее к ненаблюдаемому общему фазовому множителю). Эти переходы приводят к ошибке. Дополнительный вклад в ошибку дает фазовый множитель нерезонансного уровня $\exp\{-it2q\}$, поскольку в операторе $R_\alpha^{m-n}(\theta)$ ему соответствует единица. Ошибку, приведенную на рис.1,

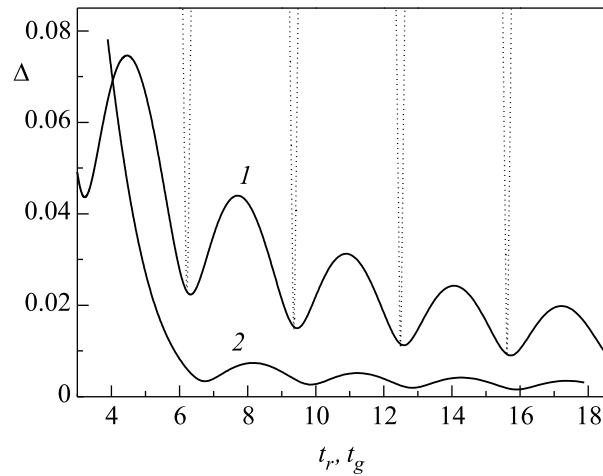


Рис.1. Зависимость ошибки селективного поворота $R_y^{1-2}(\pi/2)$ от длительности РЧ импульса (в единицах $1/q$). Сплошной линией показана ошибка модулей Δ_2 для прямоугольного импульса (1) и гауссового импульса (2) с параметрами (10). Пунктирной линией показана полная ошибка Δ_1 для гауссового импульса

оцениваем как с учетом фазы матричных элементов, так и без, по соответствующим формулам:

$$\Delta_1 = \frac{1}{3} \sqrt{\sum_{i,j} |U_{ij} - U_{ij}^{\text{теор}}|^2}, \quad (11)$$

$$\Delta_2 = \frac{1}{3} \sqrt{\sum_{i,j} ||U_{ij}| - |U_{ij}^{\text{теор}}||^2},$$

где $U_{ij}^{\text{теор}}$ – элементы матрицы идеального оператора $R_\alpha^{m-n}(\theta)$ (5), а U_{ij} – элементы матрицы оператора эволюции (3), рассчитанной в пакете MATLAB.

На фоне монотонного роста ошибки наблюдаются осцилляции с большой частотой $\omega_q \sim 2q$. Ошибка будет минимальна в том случае, если за время $t_r(t_g)$ произойдет поворот нерезонансных уровней на угол, кратный 2π . В минимумах ошибка модулей матричных элементов оказывается меньше полной, что свидетельствует о сохранении небольшой разницы фаз между этими элементами. Видно, что ошибка гауссова импульса меньше прямоугольного, но и он не может быть сделан короче $\sim 6/q$, поскольку при меньших длительностях импульса ошибка начинает резко расти.

Селективный поворот с помощью неселективных импульсов. Оператор неселективного поворота действует на три уровня сразу:

$$P_\alpha(\theta) = e^{-i\theta I_\alpha}. \quad (12)$$

Например, матрица поворота вокруг оси Y

$$P_\alpha(\theta) \equiv e^{-i\theta I_y} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \cos \theta & -\sqrt{2} \sin \theta & 1 - \cos \theta \\ \sqrt{2} \sin \theta & 2 \cos \theta & -\sqrt{2} \sin \theta \\ 1 - \cos \theta & \sqrt{2} \sin \theta & 1 + \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Для реализации (12) необходимо, чтобы амплитуда РЧ поля в (3) была много больше разницы между резонансными частотами различных переходов, то есть $\Omega \gg q$. Возьмем $\omega = \omega_0$, тогда для РЧ импульса, соответствующего (12), мы получаем из (3)

$$\{\theta\}_\alpha = e^{-it_p(H_q - \Omega I_\alpha)}, \quad (13)$$

где $t_p = \theta/\Omega$ – длительность импульса.

Для получения селективного поворота на состояниях кутрита мы должны построить такой эффективный гамильтониан в (3), который имел бы вид матриц B_α^{m-n} (6). При этом он должен включать в себя операторы, описывающие допустимые воздействия на систему. Введем обозначения:

$$A = e^{-i\varphi I_x}(H_q \tau_1) e^{i\varphi I_x}; \quad (14)$$

$$B = e^{-i\psi I_y}(H_q \tau_2) e^{i\psi I_y}; \quad C = \xi I_x + \eta I_y,$$

где первые два оператора могут быть получены из операторов свободной эволюции и операторов неселективных поворотов на основании свойства экспоненциальных операторов:

$$e^{-i\varphi I_x} e^{iHt} e^{i\varphi I_x} = e^{e^{-i\varphi I_x} \cdot Ht \cdot e^{i\varphi I_x}}, \quad (15)$$

последний – с помощью РЧ поля. Приравняв сумму матриц операторов (14) к (6), получаем систему из 9-ти уравнений:

$$B_\alpha^{m-n} = H_{\text{эфф}} \tau =$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{6}((3 \cos^2 \varphi - 1)q\tau_1 + 3(\cos^2 \psi - 1)q\tau_2) \\ \frac{\sqrt{2}}{2}i(q\tau_1 \sin \varphi \cos \varphi - \eta + i(q\tau_2 \sin \psi \cos \psi + \xi)) \\ -\frac{1}{2}((1 - \cos^2 \varphi)q\tau_1 + (\cos^2 \psi - 1)q\tau_2) \\ \frac{\sqrt{2}}{2}i(-q\tau_1 \sin \varphi \cos \varphi + \eta + i(q\tau_2 \sin \psi \cos \psi + \xi)) \\ -\frac{1}{3}((3 \cos^2 \varphi - 1)q\tau_1 + (3 \cos^2 \psi - 1)q\tau_2) \\ -\frac{\sqrt{2}}{2}i(q\tau_1 \sin \varphi \cos \varphi + \eta + i(q\tau_2 \sin \psi \cos \psi - \xi)) \\ -\frac{1}{2}((1 - \cos^2 \varphi)q\tau_1 + (\cos^2 \psi - 1)q\tau_2) \\ -\frac{\sqrt{2}}{2}i(-q\tau_1 \sin \varphi \cos \varphi - \eta + i(q\tau_2 \sin \psi \cos \psi - \xi)) \\ \frac{1}{6}((3 \cos^2 \varphi - 1)q\tau_1 + (3 \cos^2 \psi - 1)q\tau_2) \end{bmatrix},$$

совместное решение которых дает искомые значения параметров, приведенные в таблице. Обратим внимание, что параметры τ_1 и τ_2 , определяющие времена свободной эволюции, должны быть всегда положительными, поэтому селективные повороты на положительный и отрицательный углы осуществляются при разных значениях параметров РЧ поля.

Значения параметров для получения матриц B_α^{m-n}

	φ	ψ	$\tau_1 q$	$\tau_2 q$	ξ	η
B_x^{0-1}	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	0
B_{-x}^{0-1}	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$	0
B_x^{1-2}	$\frac{\pi}{2}$	$-\frac{\pi}{4}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	0
B_{-x}^{1-2}	$\frac{\pi}{2}$	$-\frac{\pi}{4}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$	0
B_y^{0-1}	$-\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$
B_{-y}^{0-1}	$-\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	0	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$
B_y^{1-2}	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$
B_{-y}^{1-2}	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	0	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$

Итак, при указанных в таблице параметрах мы получаем матрицы селективных поворотов в виде суммы:

$$\theta B_\alpha^{m-n} = \theta(A + B + C). \quad (16)$$

Поскольку операторы в этом выражении не коммутируют друг с другом, то для получения искомого результата будем использовать формулу Троттера-Сузуки [12] для экспоненциальных операторов:

$$\begin{aligned} (e^{-i\theta A/2n} e^{-i\theta B/2n} e^{-i\theta C/n} e^{-i\theta B/2n} e^{-i\theta A/2n})^n = \\ = e^{-i\theta(A+B+C)} + O((\theta/n)^3). \end{aligned} \quad (17)$$

В силу (16) при $n \rightarrow \infty$ приведенное произведение операторов сходится к идеальному селективному повороту (5).

Повторяемое n раз произведение операторов в левой части формулы (17) в скобках можно получить

с помощью РЧ импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции. Например, последовательность для селективного поворота относительно оси Y запишется в виде

$$\{\varphi\}_{-x} \xrightarrow{t_1/2} \{\varphi\}_x \cdot \{\psi\}_{-y} \xrightarrow{t_2/2} \{\psi\}_y \cdot \{\delta_y\}_y \cdot \{\psi\}_{-y} \xrightarrow{t_2/2} \{\psi\}_y \cdot \{\varphi\}_{-x} \xrightarrow{t_1/2} \{\varphi\}_x = \{\varphi\}_{-x} \quad (18)$$

$$\xrightarrow{t_1/2} \{\varphi\}_x \cdot \{\psi\}_{-y} \xrightarrow{t_2/2} \{\delta_y\}_y \xrightarrow{t_1/2} \{\psi\}_y \cdot \{\varphi\}_{-x} \xrightarrow{t_1/2} \{\varphi\}_x.$$

Здесь введены следующие обозначения: $t_1 = \theta\tau_1/n$; $t_2 = \theta\tau_2/n$; $\delta_x = \theta\xi/n$; $\delta_y = \theta\eta/n$. Стрелки $\xrightarrow{t} \equiv e^{-itH_q}$ обозначают интервалы свободной эволюции. В преобразовании (18) мы воспользовались свойством вращений вокруг одной оси (Y) и убрали два импульса. Аналогичную укороченную последовательность можно получить и для X -поворота, если поменять местами операторы A и B .

Формулы (15), (16) и (17) строго выполняются при использовании идеальных операторов неселективных поворотов (12). В реальном эксперименте эти операторы получаются с помощью оператора эволюции (13). Присутствие одновременно с РЧ полем квадрупольного взаимодействия приводит к ошибкам, исчезающим только в пределе $\Omega \rightarrow \infty$. В частности, так как при изменении знака угла поворота (изменении направления РЧ поля) знак квадрупольного взаимодействия не изменяется, то не выполняется условие

$$\{\theta\}_\alpha \cdot \{\theta\}_{-\alpha} = 1,$$

а вследствие этого и формула (15). Найденная численно ошибка (11) оператора (17), осуществленного с помощью последовательности РЧ импульсов (18), приведена на рис.2. Особенностью последовательности (18) является наличие в ней РЧ импульсов, введенных для преобразования (15) гамильтониана H_q и не масштабируемых, поэтому, при изменении n . Число таких импульсов возрастает пропорционально n и, соответственно, возрастет суммарная ошибка, обусловленная H_q в (13), и длительность последовательности. Это видно на рис.2. Следовательно, для того, чтобы иметь возможность уменьшить ошибку, связанную с некоммутативностью операторов в (17), нужно в достаточной степени увеличить амплитуду РЧ поля.

Сравнение приведенных на рис.1 и 2 результатов двух способов реализации селективных поворотов показывает, что в случае слабого квадрупольного взаимодействия с помощью составного селективного импульса можно осуществить поворот с сопоставимой точностью за время $T \sim 1/q$, значительно бо-

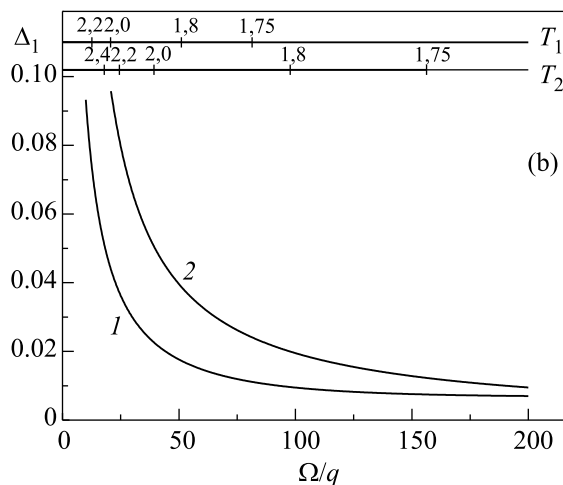
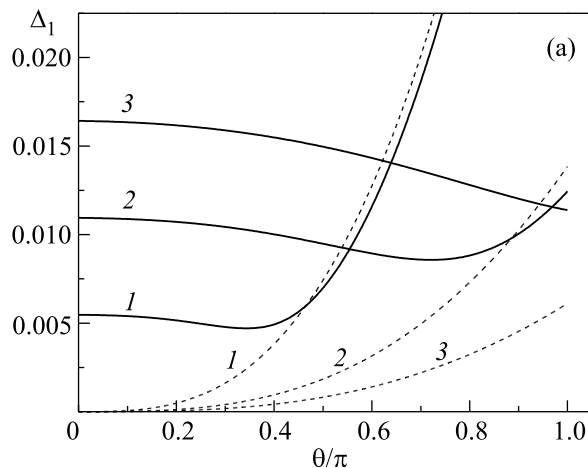


Рис.2. Зависимость полной ошибки Δ_1 для составного оператора селективного поворота $R_y^{1-2}(\theta)$ от угла θ при $\Omega = 200q$ (а) и от амплитуды РЧ поля при $\theta = \pi/2$ (б). Цифры на кривых – число повторений n в формуле (17). Штриховой линией на (а) показана та же ошибка после замены неселективных РЧ импульсов (13) идеальными операторами поворота (12). На верхней шкале (б) показана суммарная длительность T_n оператора (в единицах $1/q$), равная сумме длительностей РЧ импульсов и интервалов свободной эволюции

лее короткое, чем длительность простого селективного импульса $t_r \sim 1/\Omega \gg 1/q$. Отметим, что для π -импульса, как показал расчет, выигрыш во времени больше, чем для $\pi/2$ -импульса, показанного выше. Предложенный оператор можно использовать для реализации более сложных квантовых алгоритмов, например, квантового преобразования Фурье [6, 9].

В заключение отметим, что предложенный способ получения составного селективного импульса может быть распространен на квадрупольные ядра с большим числом уровней, а также на электронные уровни атомов и ионов в кристаллическом поле.

1. К. А. Валиев, А. А. Кокин, *Квантовые компьютеры: надежды и реальность*, Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2001.
2. А. Р. Кессель, В. Л. Ермаков, *Письма в ЖЭТФ* **70**, 59 (1999); **71**, 443 (2000).
3. A. K. Khitrin and B. M. Fung, *Phys. Rev. A* **64**, 032306 (2001).
4. R. Das, A. Mitra, V. Kumar, and A. Kumar, *Int. J. Quantum Inf.* **1**, 387 (2003).
5. R. Das and A. Kumar, *Phys. Rev. A* **68**, 032304 (2003).
6. A. B. Klimov, R. Guzman, J. C. Retamal, and C. Saavedra, *Phys. Rev. A* **67**, 062313 (2003).
7. J. Daboul, X. Wang, and B. C. Sanders, *J. Phys. A* **36**, 7063 (2003).
8. G. K. Brennen, D. P. O’Leary, and S. S. Bullock, *Phys. Rev. A* **71**, 052318 (2005).
9. В. Е. Зобов, А. С. Ермилов, *Письма в ЖЭТФ* **83**, 10 (2006).
10. M. D. Bowdrey and J. A. Jones, *Phys. Rev. A* **74**, 052324 (2006).
11. Ч. Сликтер, *Основы теории магнитного резонанса*, М.: Мир, 1981.
12. N. Hatano and M. Suzuki, *arXiv:math-ph/0506007* (2005).