

# ИЗБИРАТЕЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ СОСТОЯНИЯМИ МНОГОУРОВНЕВЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ НЕСЕЛЕКТИВНЫХ ОПЕРАТОРОВ ПОВОРОТА

*В. Е. Зобов<sup>a\*</sup>, В. П. Шауро<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия*

<sup>b</sup> *Сибирский федеральный университет  
660041, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 23 мая 2008 г.

Рассчитаны последовательности операторов неселективных поворотов, разделенных интервалами свободной эволюции, осуществляющие селективные повороты между соседними уровнями в системах с тремя, четырьмя, пятью и шестью неэквидистантными уровнями. Выполнено численное моделирование реализации полученных последовательностей на примере квадрупольных ядер с соответствующими величинами спинов, управляемых мощными неселективными радиочастотными (РЧ) импульсами, и исследованы зависимости ошибки реализации от параметров внешних и внутренних взаимодействий. Для уменьшения ошибки при недостаточно сильном РЧ-поле найдены составные неселективные РЧ-импульсы из пяти простых. Показано, что ошибка составного оператора селективного поворота может быть существенно уменьшена по сравнению с ошибкой простого одиночного селективного импульса.

PACS: 03.67.Lx

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Разработка общих правил управления квантовыми системами является одной из задач современной физики. Наиболее бурный рост интереса к ней связан с приложениями к управлению химическими реакциями и к построению квантовых компьютеров [1, 2]. При манипуляции состояниями многоуровневых квантовых систем с неэквидистантным спектром энергий обычно применяют селективные операторы, которые изменяют состояния двух выбранных уровней [3–11]. Наиболее прямым способом реализации такого воздействия является настройка частоты внешнего поля, равной резонансной частоте перехода между выбранными уровнями. Амплитуда такого поля должна быть много меньше разностей частот нужного резонансного и ненужных нерезонансных переходов. При уменьшении амплитуды приходится увеличивать длительность воздействия,

однако время эксперимента ограничено временем декогеренции.

Одним из способов сокращения времени операции может стать организация селективного оператора с помощью коротких мощных неселективных воздействий, разделенных интервалами свободной эволюции под действием внутреннего взаимодействия, ответственного за неэквидистантность уровней. Применительно к квантовым вычислениям с помощью методов ЯМР такой подход продемонстрирован на системах из двух спинов  $I = 1/2$ , имеющих близкие ларморовские частоты (см., например [12]). Предложенные последовательности не годятся для неэквидистантных уровней одного спина, обусловленных квадрупольным взаимодействием, квадратичным по операторам спиновых проекций. Для них в работе [13] мы предложили свой способ, основанный на методе эффективного гамильтониана [14, 15], и продемонстрировали его работу на примере трех уровней ядра со спином  $I = 1$ . Потребность в таких схе-

\*E-mail: rsa@iph.krasn.ru

мах связана с проведением ЯМР-экспериментов на квадрупольных ядрах в жидкокристаллических средах [5–7]. Быстрое пространственное движение молекул сужает отдельные линии в спектре ЯМР, что приводит к значительному увеличению времени декогеренции и создает благоприятные условия для реализации квантовых вычислений. Однако при этом уменьшается также и градиент кристаллического поля на квадрупольном ядре, что приводит к уменьшению неэквидистантности уровней (разницы резонансных частот отдельных линий спектра ЯМР) и создает трудности при применении простых селективных радиочастотных (РЧ) импульсов.

В настоящей работе мы распространили свой подход на четырех-, пяти- и шестиуровневые системы (со спинами  $3/2$ ,  $2$  и  $5/2$  в соответствии с формулой  $d = 2I + 1$ ,  $d$  — число уровней в системе). Для уменьшения ошибки, вызванной квадрупольным взаимодействием при повороте спина неселективным РЧ-импульсом, мы нашли для такого поворота эквивалентную последовательность из пяти РЧ-импульсов. В отличие от ранее известного варианта [15, 16] наш составной импульс уменьшает не только амплитудную, но и фазовую ошибку, что важно при реализации квантовых вычислений.

Структура статьи следующая. В разд. 2 описывается построение эффективного гамильтониана. В разд. 3 разобран метод его реализации с помощью

РЧ-импульсов и способы уменьшения ошибки. Раздел 4 содержит результаты численного моделирования. В Приложении приведено построение составного неселективного импульса.

## 2. МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТониАНА ДЛЯ СОСТАВНОГО ОПЕРАТОРА СЕЛЕКТИВНОГО ПОВОРОТА

Поворот магнитного (спинового) момента на угол  $\theta$  вокруг оси  $\alpha$  задается следующим оператором:

$$\{\theta\}_\alpha = \exp(-i\theta I_\alpha), \quad (2.1)$$

где  $I_\alpha$  — оператор проекции спина на ось  $\alpha$ . В частности, в результате поворота операторы проекций преобразуются по следующим формулам [14, 17]:

$$\begin{aligned} \exp(-i\theta I_x) I_z \exp(i\theta I_x) &= I_z \cos \theta - I_y \sin \theta, \\ \exp(-i\theta I_y) I_z \exp(i\theta I_y) &= I_z \cos \theta + I_x \sin \theta. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Соотношение для других проекций можно получить с помощью циклической замены переменных. Эти формулы справедливы для спина любой величины.

Оператор  $R_\alpha^{m-n}(\theta)$  селективного поворота на угол  $\theta$  вокруг оси  $\alpha$  двух состояний, соответствующих уровням  $m$  и  $n$  для  $d$ -уровневой квантовой системы, представляется матрицей  $d \times d$ :

$$R_\alpha^{m-n}(\theta) = \begin{bmatrix} E_m & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} & 0 & -ie^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & E_{n-m-1} & 0 & 0 \\ 0 & -ie^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} & 0 & \cos \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{d-n-1} \end{bmatrix}. \quad (2.3)$$

Здесь  $E_k$  — единичная матрица размерности  $k$ . Фаза  $\varphi$  определяет ось поворота. При  $\varphi = 0$  поворот происходит вокруг оси  $x$  ( $\alpha = x$ ,  $x$ -поворот) при  $\varphi = \pi/2$  — вокруг оси  $y$  ( $\alpha = y$ ,  $y$ -поворот). Оператор (2.3) можно записать в экспоненциальной форме:

$$R_\alpha^{m-n}(\theta) = \exp(-i\theta B_\alpha^{m-n}), \quad (2.4)$$

где в показателе экспоненты стоит матрица, у которой отличны от нуля только два элемента  $B_{ij}$  и  $B_{ji}$  ( $i = m + 1$ ,  $j = n + 1$ ).

Для возможности осуществления селективных преобразований предположим, что неэквидистантность энергетических уровней квантового магнитного момента в сильном постоянном магнитном поле  $B_0$  осуществляется взаимодействием с гамильтонианом

$$H_q = q \left( I_z^2 - \frac{1}{3} I(I+1) \right), \quad (2.5)$$

где  $q$  — константа взаимодействия,  $I$  — спин ядра. Такой вид имеют взаимодействие квадрупольного

момента ядра с градиентом кристаллического поля, а также спин-орбитальное взаимодействие электронов в аксиально-симметричных случаях [17]. Энергию будем измерять в единицах угловой частоты и примем  $\hbar = 1$ .

Для получения селективных поворотов (2.4) с помощью неселективных операторов (2.1) мы должны преобразовать оператор  $H_q$  таким образом, чтобы получить из него эффективный (средний) гамильтониан, совпадающий с  $B_\alpha^{m-n}$  (точнее,  $H_{eff}t = \theta B_\alpha^{m-n}$ ). Эта задача может быть решена многими способами. Обобщим способ, предложенный нами ранее для трехуровневой системы [13], на системы с числом уровней, большим трех.

Для рассматриваемой системы при одиночных селективных РЧ-импульсах разрешены переходы только между соседними уровнями, у операторов поворота которых отличны от нуля только недиагональные элементы, ближайšie к главной диагонали  $B_{i,i+1}$ . Такими свойствами обладают матрицы  $I_x, I_y$

и определенные комбинации матриц, полученных из гамильтониана (2.5) преобразованием (2.2):

$$\begin{aligned} K_x\left(\frac{\pi}{2}\right) + 2K_y\left(\frac{\pi}{4}\right) &= I_z I_x + I_x I_z = M_x, \\ 2K_x\left(\frac{\pi}{4}\right) + K_y\left(\frac{\pi}{2}\right) &= -(I_z I_y + I_y I_z) = M_y, \end{aligned} \quad (2.6)$$

где

$$\begin{aligned} K_x(\psi) &= \{\psi\}_x H_q \{\psi\}_{-x}, \\ K_y(\psi) &= \{\psi\}_y H_q \{\psi\}_{-y}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Перечисленные операторы могут быть реализованы на практике, как будет показано далее, с помощью неселективных РЧ-импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции.

С помощью оператора эволюции системы под действием взаимодействия (2.5) можно изменить фазы матричных элементов на величину, зависящую от состояния:

$$\begin{aligned} e^{-itH_q} M_x e^{itH_q} = M_x(t) &= \begin{bmatrix} 0 & a_{12} e^{-itk_{12}} & \dots & 0 & 0 \\ a_{21} e^{itk_{21}} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -a_{(d-1)d} e^{itk_{(d-1)d}} \\ 0 & 0 & \dots & -a_{d(d-1)} e^{-itk_{d(d-1)}} & 0 \end{bmatrix}, \\ e^{-itH_q} M_y e^{itH_q} = M_y(t) &= i \begin{bmatrix} 0 & a_{12} e^{-itk_{12}} & \dots & 0 & 0 \\ -a_{21} e^{itk_{21}} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -a_{(d-1)d} e^{itk_{(d-1)d}} \\ 0 & 0 & \dots & a_{d(d-1)} e^{-itk_{d(d-1)}} & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} k_{ij} &= k_{ji} = |I_{z,ii} + I_{z,jj}|, \\ a_{ij} &= k_{ij} I_{x,ij}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Оба оператора антисимметричны относительно своих побочных диагоналей. В обеих матрицах отличны от нуля только недиагональные элементы, ближайšie к главным диагоналям.

Комбинируя операторы (2.6) и (2.8), а также  $I_x$  и  $I_y$ , можно построить матрицу, совпадающую с точностью до коэффициента с  $B_\alpha^{m-n}$ . Если взять полученный оператор в качестве эффективного гамильтониана  $H_{eff}$ , то эволюция системы под действием  $H_{eff}$  в течение времени  $t_d^{m-n}(\theta)$  будет соответствовать оператору селективного поворота (2.4) между

соответствующей парой уровней системы на угол  $\theta$ . Ключевую роль в реализации селективности играет разница фаз между состояниями различных уровней, возникающая в результате свободной эволюции в течение времени  $t_d^{m-n}(\theta)$  под действием  $H_q$ . При этом константа  $q$  задает естественный масштаб времени и частоты. Поэтому в последующих формулах будем измерять время в единицах  $1/q$ , а частоту — в единицах  $q$ . Рассмотрим последовательно случаи  $d = 3, 4, 5, 6$ .

1)  $d = 3$ . Эффективные гамильтонианы  $H_{eff} t_3^{m-n}$  для различных поворотов кутрита, соответствующие оператору  $\theta B_\alpha^{m-n}$ , получены в работе [13]:

$$\begin{aligned} \theta B_x^{m-n} &= (\pm M_x + I_x) t_3^{m-n}, \\ \theta B_y^{m-n} &= (\mp M_y + I_y) t_3^{m-n}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$t_3^{m-n} = \frac{\theta}{2\sqrt{2}}.$$

Верхний знак перед операторами соответствует переходу 0–1, нижний — переходу 1–2.

2)  $d = 4$ . Особенностью полуцелых спинов  $3/2$  и  $5/2$  ( $d = 4$  и  $d = 6$ ) является отсутствие матричных элементов на побочных диагоналях в операторах  $M_\alpha$ . Поэтому поворот на центральном переходе необходимо получать с помощью схемы, немного отличной от описанной выше. Рассмотрим сначала два крайних перехода:

$$\begin{aligned} \theta B_x^{m-n} &= (\pm M_x + M_y(\tau)) t_4^{m-n}, \\ \theta B_y^{m-n} &= (\mp M_y + M_x(\tau)) t_4^{m-n}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$t_4^{0-1} = t_4^{2-3} = \frac{\theta}{4\sqrt{3}}, \quad \tau = \frac{\pi}{4}.$$

Верхний знак перед операторами соответствует переходу 0–1, нижний — переходу 2–3.

Центральный переход можно получить с помощью следующей суммы операторов ( $\alpha = x, y$ ):

$$\theta B_\alpha^{1-2} = (I_\alpha + I_\alpha(\tau)) t_4^{1-2}, \quad (2.12)$$

$$t_4^{1-2} = \frac{\theta}{4}, \quad \tau = \frac{\pi}{2}.$$

3)  $d = 5$ . Эффективный гамильтониан  $x$ -поворота между состояниями 0–1 или 3–4 записывается как

$$\begin{aligned} \theta B_x^{m-n} &= ([\pm M_x + I_x] + \\ &+ [-M_y(\tau) \pm I_y(\tau)]) t_5^{m-n}, \end{aligned} \quad (2.13a)$$

а между состояниями 1–2 или 2–3 имеет вид

$$\begin{aligned} \theta B_x^{m-n} &= ([\pm M_x + 3I_x] - \\ &- [-M_y(\tau) \pm 3I_y(\tau)]) t_5^{m-n} \end{aligned} \quad (2.13b)$$

(верхний знак перед операторами соответствует переходу 0–1 (1–2), нижний — переходу 3–4 (2–3)). В формулах (2.13)

$$t_5^{0-1} = t_5^{3-4} = \frac{\theta}{16}, \quad t_5^{1-2} = t_5^{2-3} = \frac{\theta}{8\sqrt{6}}, \quad \tau = \frac{\pi}{2}.$$

Для  $y$ -поворота в эффективном гамильтониане (2.13) нижние индексы  $x$  и  $y$  надо поменять местами, а знаки « $\pm$ » перевернуть.

4)  $d = 6$ . Эффективный гамильтониан  $x$ -поворота между состояниями 0–1 или 4–5 записывается как

$$\begin{aligned} \theta B_x^{m-n} &= ([M_y(\tau_1) + M_y(\tau + \tau_1)] \pm \\ &\pm [M_x + M_x(\tau)]) t_6^{m-n}, \end{aligned} \quad (2.14a)$$

а между состояниями 1–2 или 3–4 имеет вид

$$\begin{aligned} \theta B_x^{m-n} &= ([M_y(2\tau_1) - M_y(\tau + 2\tau_1)] \pm \\ &\pm [M_x - M_x(\tau)]) t_6^{m-n} \end{aligned} \quad (2.14b)$$

(верхний знак перед операторами соответствует переходу 0–1 (1–2), нижний — переходу 4–5 (3–4)). В формулах (2.14)

$$t_6^{0-1} = t_6^{4-5} = \frac{\theta}{16\sqrt{5}}, \quad t_6^{1-2} = t_6^{3-4} = \frac{\theta}{16\sqrt{2}},$$

$$\tau = \frac{\pi}{2}, \quad \tau_1 = \frac{\pi}{8}.$$

Для  $y$ -поворота в эффективном гамильтониане (2.14) нижние индексы  $x$  и  $y$  надо поменять местами, а знаки « $\pm$ » перевернуть.

Центральный переход осуществляется под действием следующего оператора ( $\alpha = x, y$ ):

$$\begin{aligned} \theta B_\alpha^{2-3} &= \\ &= ([I_\alpha + I_\alpha(\tau)] + [I_\alpha(\tau) + I_\alpha(\tau + \tau_1)]) t_6^{2-3}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$t_6^{2-3} = \frac{\theta}{12}, \quad \tau = \frac{\pi}{2}, \quad \tau_1 = \frac{\pi}{4}.$$

### 3. ПОСТРОЕНИЕ СОСТАВНОГО ОПЕРАТОРА СЕЛЕКТИВНОГО ПОВОРОТА С ПОМОЩЬЮ НЕСЕЛЕКТИВНЫХ ОПЕРАТОРОВ

В предыдущем разделе мы формально решили задачу о преобразовании  $H_q$  в оператор  $H_{eff} = \theta B_\alpha^{m-n} / t_d^{m-n}$ , представленный в виде суммы  $\sum_k H_k$ . Теперь перейдем к осуществлению такого преобразования с помощью последовательности операторов поворота (2.1), разделенных интервалами свободной эволюции с гамильтонианом  $H_q$ . Подставим представление  $H_{eff}$  в виде суммы в оператор эволюции

$$\exp(-iH_{eff}t) = \exp\left(-it \sum_k H_k\right). \quad (3.1)$$

Формально искомую последовательность можно получить из равенства (3.1), если переписать его пра-

вую часть в виде произведения экспонент и воспользоваться свойством экспоненциальных операторов:

$$\begin{aligned} \exp(e^{-i\psi I_\alpha}(-itH_q)e^{i\psi I_\alpha}) &= \\ &= e^{-i\psi I_\alpha}e^{-itH_q}e^{i\psi I_\alpha} = \{\psi\}_\alpha - t - \{\psi\}_{-\alpha}, \\ \exp(e^{-itH_q}(-iM_\alpha)e^{itH_q}) &= \\ &= e^{-itH_q}e^{-iM_\alpha}e^{itH_q} = -t - e^{-iM_\alpha} - (-t) - . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Здесь и далее в выражениях для импульсных последовательностей оператор свободной эволюции в течение времени  $t$  будем записывать как « $-t-$ ».

Фактически же операторы в сумме (3.1) не коммутируют между собой, поэтому для получения импульсной последовательности, действие которой эквивалентно эволюции с гамильтонианом  $H_{eff}$ , используем формулу Троттер–Сузуки для экспоненциальных операторов [18]:

$$\begin{aligned} \exp\left(-it \sum_k H_k\right) &= \\ &= \left(\prod_k \exp\left(-\frac{iH_k t_k}{N}\right)\right)^N + O\left(\left(\frac{t}{N}\right)^2\right), \\ \sum_k t_k &= t. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Для улучшения сходимости будем выполнять симметризацию произведения операторов в этой формуле. Применительно к многоимпульсной ЯМР-спектроскопии эти методы хорошо изучены и описаны в монографиях (см., например, [14, 15]). Ниже отдельно рассмотрены импульсные последовательности для  $d = 3, 4, 5, 6$ .

Обратим внимание, что в формуле (3.2) встречаются операторы «обратной» свободной эволюции:

$$\exp(iH_q t). \quad (3.4)$$

Для получения такого оператора мы можем продлить время в разрешенном операторе эволюции на период  $T$ :

$$\exp(-iH_q(T-t)). \quad (3.5)$$

Для целых спинов ( $d = 3, 5$ )  $T = 2\pi$ , а для полуцелых ( $d = 4, 6$ )  $T = \pi$ . Это значительно увеличивает общую длительность последовательности. Возможен другой способ добиться «обратной» свободной эволюции с оператором (3.4) — с помощью составного импульса (П.11). В настоящей работе мы им не

будем пользоваться, поскольку последовательности усложняются и ошибка увеличивается.

1) Случай  $d = 3$ . Для получения импульсной последовательности, осуществляющей селективный поворот на кутрите, распишем оператор  $M_\alpha$  в (2.10) через операторы  $K_x$  и  $K_y$  и затем проведем симметризацию экспоненциальных операторов (3.3) по схеме  $ABCBA$  [18]:

$$\begin{aligned} \left(e^{-i\theta A/2N}e^{-i\theta B/2N}e^{-i\theta C/N}e^{-i\theta B/2N}e^{-i\theta A/2N}\right)^N &= \\ &= e^{-i\theta(A+B+C)} + O\left(\left(\frac{\theta}{N}\right)^3\right). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Для  $y$ -поворота удобно выбрать  $A = K_x$ ,  $B = K_y$ ,  $C = I_y$ . В результате мы приходим к импульсным последовательностям, полученным ранее в работе [13]. Например, селективный  $y$ -поворот между состояниями 0–1 кутрита можно записать на основании (2.10) и (3.6) в виде следующей последовательности операторов:

$$\begin{aligned} \left[\left\{\frac{\pi}{4}\right\}_x - \frac{\theta}{2\sqrt{2}N} - \left\{\frac{\pi}{4}\right\}_{-x} \left\{\frac{\pi}{2}\right\}_y - \frac{\theta}{4\sqrt{2}N} - \right. \\ \left. - \left\{\frac{\theta}{2\sqrt{2}N}\right\}_{-y} - \frac{\theta}{4\sqrt{2}N} - \left\{\frac{\pi}{2}\right\}_{-y} \left\{\frac{\pi}{4}\right\}_x - \right. \\ \left. - \frac{\theta}{2\sqrt{2}N} - \left\{\frac{\pi}{4}\right\}_{-x}\right]^N. \end{aligned} \quad (3.7)$$

2) Случай  $d = 4$ . При построении импульсной последовательности для спина  $I = 3/2$  важно то, что операторы в сумме (2.11) коммутируют друг с другом (так как отсутствует центральный связывающий переход). Поэтому в симметризации нуждаются только операторы  $M_\alpha$ , а не вся сумма. В данном случае симметризовать будем по схеме  $ABA$ :

$$\begin{aligned} \left(e^{-i\theta A/2N}e^{-i\theta B/N}e^{-i\theta A/2N}\right)^N &= \\ &= e^{-i\theta(A+B)} + O\left(\left(\frac{\theta}{N}\right)^3\right), \end{aligned} \quad (3.8)$$

где  $A = K_x$ ,  $B = K_y$ . К тому же операторы (2.6) соответствуют одновременному повороту на двух крайних переходах, но в противоположных направлениях, а операторы (2.8) — в одном направлении. Это может использоваться при получении более сложных вентиляей.

Для  $y$ -поворота на состояниях 0–1 получаем последовательность

$$\left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_x \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-y} - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_y \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_x \right]^N - \frac{\pi}{4} - \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_y - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-y} \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_x - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-x} \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_y - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-y} \right]^N - \frac{3\pi}{4} . \quad (3.9)$$

Воспользовавшись свойством коммутативности операторов  $z$ -поворотов  $\left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_y \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{\pm x} \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-y}$  и  $\left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-x} \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{\pm y} \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_x$  с квадрупольным гамильтонианом, эту последовательность можно упростить:

$$\left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-y} - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_y - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_x \right]^N - \frac{\pi}{4} - \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_y - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_x - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{4\sqrt{3}N} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-y} \right]^N - \frac{3\pi}{4} . \quad (3.10)$$

Для  $y$ -поворота на состояниях 1-2 (центральный переход) получаем последовательность

$$\left[ \left\{ \frac{\theta}{8N} \right\}_y - \frac{\pi}{2} - \left\{ \frac{\theta}{4N} \right\}_y - \frac{\pi}{2} - \left\{ \frac{\theta}{8N} \right\}_y \right]^N . \quad (3.11)$$

3) Случай  $d = 5$ . В последовательности (3.3) эффективного гамильтониана (2.13) симметризуем сначала слагаемые в квадратных скобках аналогично трехуровневой системе, а затем всю сумму по схеме  $ABA$ . Для  $y$ -поворота на состояниях 0-1 получаем последовательность

$$\left[ \text{Seq}_1 - \frac{\pi}{2} - \text{Seq}_2 - \frac{3\pi}{2} - \text{Seq}_1 \right]^N , \quad (3.12)$$

$$\text{Seq}_1 \equiv \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{32N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_x \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-y} - \frac{\theta}{64N^2} - \left\{ \frac{\theta}{32N^2} \right\}_y - \frac{\theta}{64N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_y \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{32N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_x \right]^N ,$$

$$\text{Seq}_2 \equiv \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_y - \frac{\theta}{16N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-y} \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_x - \frac{\theta}{32N^2} - \left\{ \frac{\theta}{16N^2} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{32N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-x} \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_y - \frac{\theta}{16N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-y} \right]^N .$$

4) Случай  $d = 6$ . Операторы в квадратных скобках в формулах (2.14) коммутируют друг с другом, поэтому необходимо симметризовать только сумму операторов внутри скобок и сами операторы  $M_\alpha$ .

Для  $y$ -поворота на состояниях 0-1 получаем последовательность

$$(\text{Seq}_1)^N - \frac{\pi}{8} - (\text{Seq}_2)^N - \frac{7\pi}{8} , \quad (3.13)$$

$$\text{Seq}_1 \equiv \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-y} - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_y - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_x \right]^N - \frac{\pi}{2} - \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{16\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-y} - \frac{\theta}{16\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_y - \frac{\theta}{16\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_x \right]^N - \frac{\pi}{2} - \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-y} - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_y - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_x \right]^N ,$$

$$\text{Seq}_2 \equiv \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_y - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_x - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-y} \right]^N - \frac{\pi}{2} - \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_y - \frac{\theta}{16\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_x - \frac{\theta}{16\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{16\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-y} \right]^N - \frac{\pi}{2} - \left[ \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_y - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_x - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_{-x} - \frac{\theta}{32\sqrt{5}N^2} - \left\{ \frac{\pi}{4} \right\}_{-y} \right]^N,$$

где проведено преобразование, аналогичное (3.10).

Для  $y$ -поворота на состояниях 2–3 (центральный переход) получаем последовательность

$$\text{Seq}_1 - \frac{\pi}{4} - \text{Seq}_1 - \frac{3\pi}{4}, \quad (3.14)$$

$$\text{Seq}_1 \equiv \left[ \left\{ \frac{\theta}{24N} \right\}_y - \frac{\pi}{2} - \left\{ \frac{\theta}{12N} \right\}_y - \frac{\pi}{2} - \left\{ \frac{\theta}{24N} \right\}_y \right]^N.$$

Последовательности для поворотов вокруг оси  $x$  и других переходов получаются из приведенных после замены операторов, которую легко вывести из вида выражений (2.10)–(2.15).

#### 4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАЛИЗАЦИИ СОСТАВНОГО ОПЕРАТОРА СЕЛЕКТИВНОГО ПОВОРОТА С ПОМОЩЬЮ НЕСЕЛЕКТИВНЫХ РЧ-ИМПУЛЬСОВ

Для управления квадрупольным ядром будем прикладывать переменное радиочастотное магнитное поле. РЧ-импульс получаем при действии поля с амплитудой  $B_1$  и частотой  $\omega$  в течение конечного времени  $t_p \gg 1/\omega$ . Будем рассматривать РЧ-импульсы прямоугольной формы, т. е. полагаем, что РЧ-поле включается и выключается мгновенно, а на протяжении всего импульса его амплитуда постоянна. Во вращающейся с частотой  $\omega$  системе координат [17] изменение состояния во времени задается оператором эволюции

$$U(t) = e^{-iHt} \quad (4.1)$$

с независимым от времени эффективным гамильтонианом  $H$ :

$$H = (\omega - \omega_0)I_z + q \left( I_z^2 - \frac{1}{3}I(I+1) \right) + \Omega(I_x \cos \varphi + I_y \sin \varphi). \quad (4.2)$$

Здесь  $\omega_0 = \gamma B_0$  — ларморовская частота прецессии спина,  $\Omega = \gamma B_1$  — амплитуда РЧ-поля. Фаза РЧ-поля  $\varphi$  определяет направление поля в такой системе координат. Для реализации поворота (2.1)

необходимо, чтобы амплитуда РЧ-поля в выражении (4.2) была много больше разницы между резонансными частотами различных переходов, т. е.  $\Omega \gg q$ . Возьмем  $\omega = \omega_0$ , тогда для РЧ-импульса, соответствующего (2.1), получаем из (4.1)

$$P_\alpha(\theta) = \exp(-it_p(H_q + \Omega I_\alpha)), \quad (4.3)$$

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

Формулы предыдущего раздела строго выполняются при использовании идеальных операторов неселективных поворотов (2.1). В реальном эксперименте эти операторы получаются с помощью оператора эволюции (4.3). Присутствие одновременно с РЧ-полем квадрупольного взаимодействия приводит к ошибкам, исчезающим только в пределе  $\Omega \rightarrow \infty$  (см. Приложение). В частности, так как при изменении знака угла поворота (изменении направления РЧ-поля) знак квадрупольного взаимодействия не изменяется, то не выполняется условие

$$P_\alpha(\theta)P_{-\alpha}(\theta) = 1,$$

а вследствие этого и формулы (3.2).

Другой известный способ уменьшения ошибки неселективного поворота состоит в применении составных (композиционных) импульсов [15, 16]. В частности, в работе [16] предложены композиционные импульсы для уменьшения ошибки поворота вследствие квадрупольного взаимодействия для ядра с  $I = 1$ . К сожалению, предложенные варианты не устраняют фазовые искажения и поэтому неэффективны для наших целей. В Приложении получены композиционные импульсы, состоящие из пяти импульсов и устраняющие линейный по  $q/\Omega$  вклад в ошибку для спинов произвольной величины. В общем случае для поворота на угол  $\theta$  вокруг оси  $x$  последовательность записывается в виде

$$P_{-y} \left( \frac{3\pi}{2} \right) - \tau_1 - P_{-y} \left( \frac{\pi}{2} \right) P_{-x} \left( \frac{3\pi}{2} \right) - \tau_2 - P_{-x}(\psi_1)P_x(\psi_2), \quad (4.4)$$

$$b = \arcsin \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \theta \right), \quad \psi_1 = \frac{\pi}{2} - b, \quad \psi_2 = \theta - b,$$

где времена свободной эволюции определяются как

$$\begin{aligned} \tau_1 &= \frac{1}{\Omega} \left[ \pi + \frac{1}{2} \left( \theta - 2b - \sin 2b + \frac{1}{2} \sin 2\theta \right) \right], \\ \tau_2 &= \frac{1}{\Omega} \left[ \pi - \sin 2b + \frac{1}{2} \sin 2\theta \right]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Для  $y$ -поворота следует нижние индексы  $x$  и  $y$  переставить местами.

В частности, для неселективного поворота относительно оси  $x$  на угол  $\pi/2$  находим в (4.4)

$$\begin{aligned} \psi_1 = \psi_2 &= \frac{\pi}{4}, \quad \tau_1 = \left( \pi - \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\Omega}, \\ \tau_2 &= \frac{\pi - 1}{\Omega}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

а для угла  $\pi/4$  —

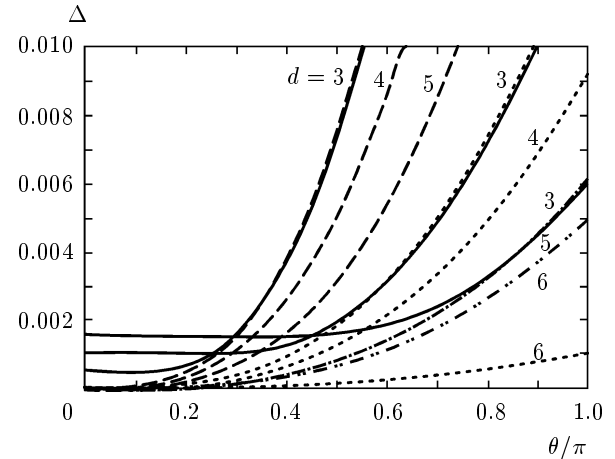
$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{\pi}{3}, \quad \psi_2 = \frac{\pi}{12}, \\ \tau_1 &= \left( \frac{23}{24}\pi - \frac{\sqrt{3}-1}{4} \right) \frac{1}{\Omega}, \\ \tau_2 &= \left( \pi - \frac{\sqrt{3}-1}{2} \right) \frac{1}{\Omega}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Итак, неселективный поворот спина можно реализовать с помощью простого (4.3) или составного (4.4) РЧ-импульса. Подставив эти операторы в полученные выше формулы для составных селективных поворотов, мы выполнили численное моделирование экспериментальной ситуации. Результаты расчета приведены на рисунках для различных селективных поворотов спинов разной величины в виде ошибки

$$\Delta = \frac{1}{d} \sqrt{\sum_{i,j} |U_{ij} - U_{ij}^{teor}|^2}, \quad (4.8)$$

где  $U_{ij}^{teor}$  — элементы матрицы идеального оператора селективного поворота  $R_\alpha^{m-n}(\theta)$  (2.3), а  $U_{ij}$  — элементы численно рассчитанной матрицы, полученной с помощью произведения операторов эволюции (4.1). Некоторые характеристики последовательностей РЧ-импульсов собраны в таблице.

На рис. 1 показаны результаты для последовательности операторов идеальных неселективных поворотов при разных  $\theta$  и  $I$ . Этот рисунок иллюстрирует угловые зависимости величины ошибки, возникающей из-за некоммутативности операторов, составляющих  $H_{eff}$ . Видно, что эта ошибка растет при увеличении угла поворота, поэтому при больших углах придется дробить последовательности на большее число циклов (увеличивать  $N$ ).



**Рис. 1.** Зависимости ошибки составных селективных поворотов  $R_y^{0-1}$  от угла  $\theta$  для различных  $d$  и различных чисел повторений  $N$  в формуле (3.3):  $N = 1$  — штриховые линии,  $N = 2$  — пунктирные,  $N = 3$  — штрихпунктирные (только для  $d = 3$ ). Сплошными линиями показана ошибка при использовании в составном операторе селективного поворота  $R_y^{0-1}(\theta)$  составных неселективных РЧ-импульсов при  $\Omega = 50q$  вместо идеальных операторов поворотов. Пунктирная линия для  $d = 5$  и штриховая для  $d = 6$  на рисунке совпали

Такие идеальные повороты достигаются в пределе  $\Omega/q \rightarrow \infty$ . При конечных значениях этого параметра, как видно на рис. 2 и 3, добавляется ошибка, обусловленная искажением оператора неселективного поворота (4.3) при одновременном действии РЧ-поля и  $H_q$ . Эту часть ошибки можно уменьшить, заменив простые импульсы в последовательностях на составные (см. рис. 2 и 3, а также рис. 1 и соответствующий рисунок работы [13]). На рис. 2 приведена ошибка селективного поворота на спинах  $I = 1$  и  $I = 2$ . На рис. 3 выполнено сравнение ошибки селективных поворотов для разных переходов спина  $I = 5/2$ . Особенностью центрального перехода является меньшая ошибка при использовании простых РЧ-импульсов в последовательности (3.15) по сравнению с составными неселективными поворотами. Причину этого легко понять с помощью рис. 5 (см. далее). Для центрального перехода угол поворота РЧ-импульсов  $\pi/24$  мал и попадает в область левее пересечения линий зависимостей ошибок (т. е. простые импульсы приводят к малой ошибке, поэтому составные импульсы ее увеличивают, добавляя ошибку от дополнительных импульсов). При этом для двух других переходов в последовательностях (3.14) углы большие ( $\pi/4$  и  $\pi/2$ ) и попадают справа



Таблица. Характеристики составных операторов селективных поворотов  $R_{\alpha}^{m-n}(\theta)$  для различных  $d$

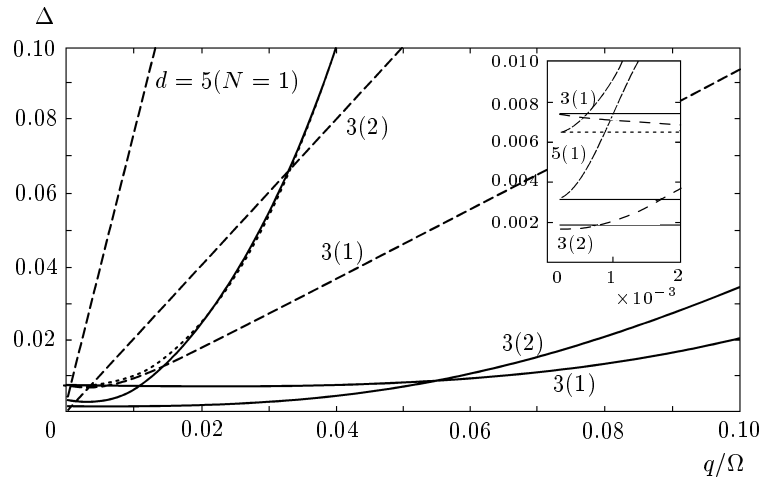
$m-n$	$T_p = \sum t_p$	$T_c = \sum t_c$	$T_{\infty}$	$N_S$
$d = 3$				
0-1, 1-2	$\frac{\theta}{2\sqrt{2}\Omega} + \frac{2\pi N}{\Omega}$	$\frac{N}{\Omega} \left( 4a\left(\frac{\pi}{4}\right) + 2a\left(\frac{\pi}{2}\right) + a\left(\frac{\theta}{2\sqrt{2}N}\right) \right)$	$\frac{3\theta}{2\sqrt{2}}$	$7N$
$d = 4$				
0-1, 2-3	$\frac{3\pi N}{\Omega}$	$\frac{4N}{\Omega} \left( a\left(\frac{\pi}{4}\right) + a\left(\frac{\pi}{2}\right) \right)$	$\frac{3\theta}{2\sqrt{3}} + \pi$	$8N$
1-2	$\frac{\theta}{2\Omega}$	$\frac{N}{\Omega} \left( 2a\left(\frac{\theta}{8N}\right) + a\left(\frac{\theta}{4N}\right) \right)$	$\pi N$	$3N$
$d = 5$				
0-1, 3-4	$\frac{\theta}{8\Omega} + \frac{6\pi N^2}{\Omega}$	$\frac{N^2}{\Omega} \left( 12a\left(\frac{\pi}{4}\right) + 6a\left(\frac{\pi}{2}\right) + 2a\left(\frac{\theta}{32N^2}\right) + a\left(\frac{\theta}{16N^2}\right) \right)$	$\frac{3\theta}{8} + 2\pi N$	$21N^2$
1-2, 2-3	$\frac{3\theta}{8\Omega} + \frac{6\pi N^2}{\Omega}$	$\frac{N^2}{\Omega} \left( 12a\left(\frac{\pi}{4}\right) + 6a\left(\frac{\pi}{2}\right) + 2a\left(\frac{3\theta}{32N^2}\right) + a\left(\frac{3\theta}{16N^2}\right) \right)$	$\frac{3\theta}{4\sqrt{6}} + 2\pi N$	$21N^2$
$d = 6$				
0-1, 4-5	$\frac{9\pi N^2}{\Omega}$	$\frac{12N^2}{\Omega} \left( a\left(\frac{\pi}{4}\right) + a\left(\frac{\pi}{2}\right) \right)$	$\frac{3\theta}{4\sqrt{5}} + \pi(2N + 1)$	$24N^2$
1-2, 3-4	$\frac{9\pi N^2}{\Omega}$	$\frac{12N^2}{\Omega} \left( a\left(\frac{\pi}{4}\right) + a\left(\frac{\pi}{2}\right) \right)$	$\frac{3\theta}{4\sqrt{2}} + \pi(2N + 1)$	$24N^2$
2-3	$\frac{\theta}{3\Omega}$	$\frac{2N}{\Omega} \left( 2a\left(\frac{\theta}{24N}\right) + a\left(\frac{\theta}{12N}\right) \right)$	$\pi(2N + 1)$	$6N$

*Примечание.*  $N_S$  — число операторов неселективных поворотов (простых или составных) в последовательности,  $T_p = \sum t_p$  — суммарная длительность простых неселективных РЧ-импульсов,  $T_c = \sum t_c$  — суммарная длительность составных неселективных РЧ-импульсов,  $T_{\infty}$  — суммарная длительность интервалов свободной эволюции.

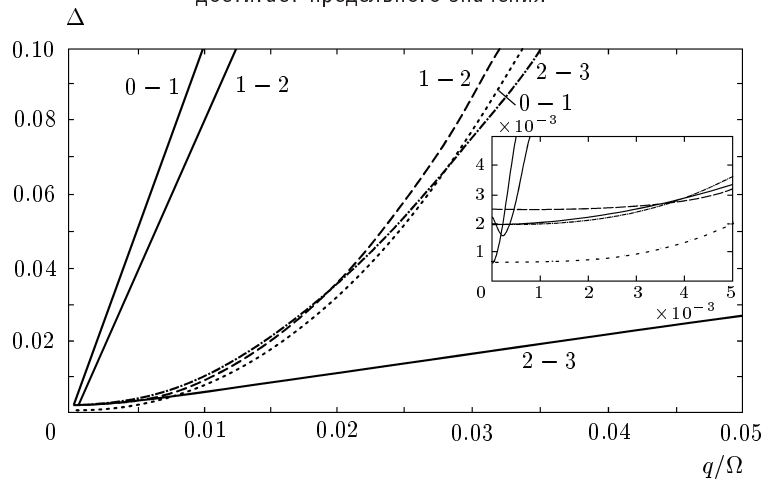
от пересечения. Естественно, что в пределе  $\Omega \rightarrow \infty$  ошибки двух последовательностей для каждого перехода достигают общего предельного значения — ошибки для последовательности из идеальных операторов неселективных поворотов. Та же особенность наблюдается у центрального перехода спина  $I = 3/2$ .

На рис. 4 для  $I = 3/2$  показана зависимость ошибки от длительностей селективных ( $\pi/2$ ) операторов поворота — простого ( $T_S = t_p = \theta/\Omega$ ) и составного — для двух переходов 0-1 и 1-2. Составной оператор получен двумя способами: во-первых, с помощью последовательности простых неселективных импульсов, во-вторых, с помощью той же последовательности с составными неселективными операторами

поворота (4.4). Формулы для длительностей последовательностей приведены в таблице. Соответствующие пары кривых сходятся при  $T_S \rightarrow T_{\infty}$ , где  $T_{\infty}$  — предельное значение суммарной длительности, которое определяется суммарной длительностью интервалов свободной эволюции и достигается в пределе  $\Omega \rightarrow \infty$ . Для перехода 0-1  $T_{\infty} = 1.433\pi$ , а для перехода 1-2  $T_{\infty} = N\pi$ , поскольку особенностью центрального перехода является неизменность длительности интервалов свободной эволюции  $\tau = \pi/2$  при увеличении  $N$ . Минимальное значение ошибки  $\Delta_{\infty}$  связано с некоммутативностью операторов и уменьшается при переходе от  $N = 1$  к  $N = 2$  для обоих переходов в равной степени. При этом для перехода 1-2 время  $T_{\infty}$  удваивается.



**Рис. 2.** Зависимости ошибки составных селективных поворотов  $R_y^{0-1}(\pi/2)$  и  $R_y^{1-2}(\pi/2)$  для  $d = 3, 5$  от обратной величины амплитуды неселективных РЧ-импульсов. Сплошными линиями показаны зависимости при использовании составных неселективных РЧ-импульсов, штриховыми — простых. Кривые для обоих переходов при  $d = 3$  совпадают, а при  $d = 5$  переход 1-2 выделен пунктирной линией. На вставке увеличена область вблизи нуля, где ошибка достигает предельного значения

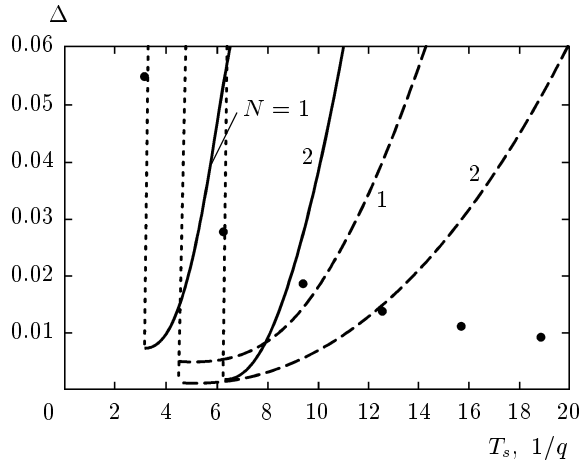


**Рис. 3.** Зависимости ошибки составных селективных поворотов  $R_y^{m-n}(\pi/2)$  для  $d = 6$  от обратной величины амплитуды неселективных РЧ-импульсов. Сплошными линиями показаны зависимости при использовании простых импульсов, другими линиями — составных импульсов. Цифры у кривых — соответствующие переходы  $m-n$ . На вставке увеличена область вблизи нуля, где ошибка достигает предельного значения

При конечных  $\Omega$  длительность последовательностей увеличивается на суммарную длительность РЧ-импульсов простых  $T_p$  или составных  $T_c$  неселективных поворотов (см. таблицу). Показанные на рис. 4 зависимости можно понять в предположении, что в рассматриваемой области  $\Omega/q \rightarrow \infty$  ошибки (П.7) или (П.8) (см. Приложение) РЧ-импульсов складываются. Для простых импульсов

$$\Delta_p = \Delta_\infty + qI(I+1) \sum t_p f_p \approx \approx \Delta_\infty + (T_S - T_\infty)b_p, \quad (4.9)$$

где  $b_p$  — некоторая константа. Здесь мы приближенно вынесли  $f_p$  из-под знака суммы и воспользовались тем, что  $T_p = \sum t_p = T_S - T_\infty$ . Линейную зависимость от  $T_S$  мы видим на рис. 4. Параллельность пунктирных прямых свидетельствует о близости соответствующих коэффициентов. Для составных неселективных РЧ-импульсов при фиксированном значении  $\Omega$  длительность и ошибка одного такого импульса слабо зависят от угла, поэтому суммарная ошибка определяется их числом  $N_S$ :



**Рис. 4.** Зависимости ошибки реализации селективных поворотов  $R_y^{m-n}(\pi/2)$  для  $d = 4$  от длительности РЧ-импульса ( $T_S = t_p$ ) или от общей длительности импульсной последовательности. Показаны значения для переходов 0–1 (штриховые линии), 1–2 (сплошные) при использовании составных неселективных импульсов ( $T_S = T_\infty + T_c$ ). Пунктирные линии соответствуют последовательностям из простых неселективных импульсов ( $T_S = T_\infty + T_p$ ). Для поворота простым селективным РЧ-импульсом точками показаны минимальные значения быстро осциллирующей ошибки [13]

$$\Delta_c = \Delta_\infty + q^2 I^2 (I + 1)^2 \sum t_c^2 f_c \approx \approx \Delta_\infty + (T_S - T_\infty)^2 b_c / N_S, \quad (4.10)$$

поскольку  $t_c \approx (T_S - T_\infty) / N_S$ . Здесь  $b_c$  — некоторая константа. Соответствующее изменение вида парабол при изменении  $N_S$  наблюдается на рис. 4.

На рис. 4 для сравнения приведена ошибка (4.8) поворота в результате обычного селективного прямоугольного РЧ-импульса. Точками показаны только минимальные значения, которые достигаются при выполнении условия изменения фазы нерезонансных уровней на  $2\pi$  за время  $T_S = t_p = \theta / \Omega$ . При изменении длительности импульса ошибка быстро растет (см. [13]). Видно, что применение составных операторов селективного поворота позволяет уменьшить ошибку при том же времени (или уменьшить время при той же ошибке). Указанные свойства наблюдаются и в системах с большим числом уровней.

В качестве конкретного примера обратимся к экспериментальной работе [6], в которой реализовано управление состояниями кутрита с помощью методов ЯМР. Бралось ядро дейтерия ( $I = 1$ ), частич-

но ориентированное в жидкокристаллической матрице при комнатной температуре. Спектр ЯМР дейтерия [6] состоял из двух линий, соответствующих параметру  $q = 120$  Гц в (2.5). Авторы применяли как селективные, так и неселективные РЧ-импульсы. Для неселективных РЧ-импульсов прямоугольной формы выполняется условие  $\Omega/q \approx 100$ . При этих значениях параметров находим по формулам, приведенным в таблице, для составного селективного поворота на угол  $\pi/2$  при  $N = 1$ :

$$T_\infty = 2.2 \text{ мс}, \quad T_\infty + T_p = 2.3 \text{ мс}, \quad (4.11)$$

$$T_\infty + T_c = 3.9 \text{ мс}.$$

В работе [6] длительность простого селективного РЧ-импульса гауссовой формы для поворота на угол  $\pi/2$  была 6 мс. Хотя при взятых из работы параметрах длительность составного селективного импульса (4.11) оказалась меньше всего в 1.5–2 раза, но ошибка выполнения операции будет существенно меньшей, как можно заключить, например, из сравнения рис. 2 настоящей работы с результатами для гауссового импульса на рис. 1 работы [13].

В своих расчетах мы использовали РЧ-импульсы прямоугольной формы, которые позволили наиболее просто продемонстрировать теоретические идеи. К сожалению, РЧ-импульсы реальных ЯМР-спектрометров не бывают идеальными, что приводит к увеличению ошибки при увеличении их числа. С целью уменьшения таких ошибок [15] на практике используют импульсы более сложной формы или составные импульсы. Переход к ним не затронет качественных выводов предложенного подхода, хотя и приведет к усложнению формул и расчетов. Эти уточнения связаны с характеристиками конкретного прибора, поэтому при выполнении эксперимента соответствующие расчеты придется делать в процессе настройки.

В другой работе [7] этой же группы экспериментаторов рассмотрено квадрупольное ядро  $^{23}\text{Na}$  ( $I = 3/2$ ) с четырьмя уровнями в жидкокристаллической матрице. По числу РЧ-импульсов, необходимых для реализации составного селективного поворота, случай четырех уровней не сложнее предыдущего (см. таблицу), а для центрального перехода даже проще. Однако в этом случае наблюдается большее расщепление спектра ЯМР, поскольку квадрупольный момент натрия больше, чем у дейтерия, почти в 50 раз. Поэтому имеют место более благоприятные условия для применения простых селективных импульсов. Для обеспечения условий применения составных селективных импульсов, описанных

выше, придется увеличить амплитуду РЧ-поля по сравнению со случаем ядер дейтерия или нагреть образец для уменьшения параметра порядка жидкого кристалла.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для уменьшения ошибки обычного селективного РЧ-импульса приходится уменьшать его амплитуду и увеличивать длительность. При выбранной длительности  $t_p \sim 1/q$  ошибка конечна. Изменение формы короткого импульса уменьшает ее несущественно [13]. Выше показано, что ошибку селективного поворота можно уменьшить теоретически до нуля, если осуществлять поворот с помощью последовательности мощных неселективных РЧ-импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции под действием квадрупольного взаимодействия. Из-за присутствия таких интервалов суммарная длительность последовательности  $T_S$  не может быть сделана меньше некоторого предельного значения  $T_\infty$ , зависящего от величины квадрупольного взаимодействия ( $q$  и  $I$ ), а также от устройства последовательности. Другими словами, при  $T_S > T_\infty$  теория позволяет добиться предела  $\Delta \rightarrow 0$  с помощью составных селективных импульсов, тогда как для простого селективного импульса  $\Delta \rightarrow 0$  только при  $T_S \rightarrow \infty$ . Принципиальная возможность такого уменьшения ошибки важна для квантовых вычислений, поскольку только при величине  $\Delta$ , меньшей некоторого критического значения, можно применять процедуру исправления ошибки [1].

В заключение заметим, что полученные последовательности неселективных операторов поворота могут быть полезны не только для квадрупольных ядер, рассмотренных выше, но и для электронных спинов, управляемых микроволновыми или лазерными импульсами, в системах со слабым аксиально-симметричным спин-орбитальным взаимодействием.

Один из авторов (В. П. Ш.) благодарит фонд «Династия» за финансовую поддержку.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### Составной неселективный импульс

В основу построения составного импульса положим свойство гамильтониана (2.5), вытекающее из свойства суммы квадратов операторов трех проекций:

$$I_x^2 + I_y^2 + I_z^2 - I(I+1) = 0. \quad (\text{П.1})$$

Отсюда понятен выбор для компенсации ошибки двух пар операторов по концам интервалов свободной эволюции в последовательности (4.4). Пятый импульс необходим для формирования нужного суммарного поворота. Под действием прямоугольного импульса (4.3) оператор  $I_z$  меняется не мгновенно, а по формулам (2.2), где  $\theta = \Omega t$ , поэтому для параметров получены более сложные соотношения (4.5).

Итак, пусть к магнитному моменту ядра приложено изменяющееся во времени сильное РЧ-поле (4.2). При  $q = 0$  оператор эволюции принимает вид

$$U_0(t) \equiv \{\theta\}_\alpha = \hat{T} \exp \left( i \int_0^t \Omega(\tau) [I_x \cos \varphi(\tau) + I_y \sin \varphi(\tau)] d\tau \right). \quad (\text{П.2})$$

При  $q \neq 0$ , ограничившись первым порядком по малой величине  $q/\Omega$ , получаем

$$U(t) = U_0(t) \left[ 1 - i \int_0^t U_0^{-1}(\tau) H_q U_0(\tau) d\tau \right]. \quad (\text{П.3})$$

На основании (2.2) представим временную зависимость оператора магнитного момента в следующем виде:

$$U_0^{-1}(\tau) I_z U_0(\tau) = \mu_x(\tau) I_x + \mu_y(\tau) I_y + \mu_z(\tau) I_z. \quad (\text{П.4})$$

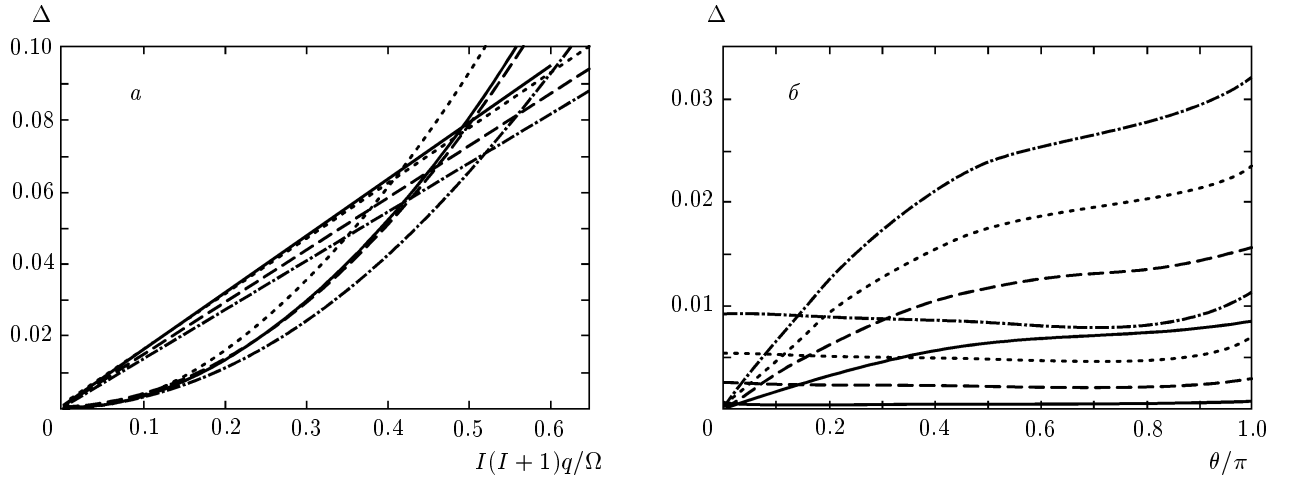
После подстановки этого выражения в формулу (П.3) из условия обращения в нуль интеграла в скобках получаем систему из шести уравнений:

$$\frac{1}{t} \int_0^t \mu_\alpha^2(\tau) d\tau = \frac{1}{3}, \quad \alpha = x, y, z, \quad (\text{П.5})$$

$$\begin{aligned} \int_0^t \mu_x(\tau) \mu_z(\tau) d\tau &= \int_0^t \mu_x(\tau) \mu_y(\tau) d\tau = \\ &= \int_0^t \mu_y(\tau) \mu_z(\tau) d\tau = 0. \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

Легко проверить, что составной импульс (4.4) удовлетворяет этим уравнениям. Условие (П.2) выполняется при любом  $b$ , поскольку при  $q = 0$  идеальные повороты

$$P_{-x}(\psi_1) = \left\{ \frac{\pi}{2} - b \right\}_{-x}, \quad P_x(\psi_2) = \{\theta - b\}_x$$



**Рис. 5.** Сравнение ошибок реализации простых и составных неселективных  $y$ -поворотов:  $d = 3$  (сплошные линии), 4 (штриховые), 5 (пунктирные), 6 (штрихпунктирные). *а)* Зависимости от обратной величины амплитуды РЧ-импульсов при угле поворота  $\pi/2$ . Параболические кривые соответствуют составному импульсу, прямые линии — простому. *б)* Зависимости от угла  $\theta$  при амплитуде РЧ-импульсов  $\Omega = 50q$  для простых (возрастающие кривые) или составных (слабо меняющиеся линии) импульсов

осуществляются в противоположные стороны вокруг одной оси. Величина этого параметра определяется из последнего равенства в (П.6). Положительный вклад в интеграл от двух последних импульсов должен компенсировать отрицательный вклад от третьего импульса. После чего выполнение условий (П.5) достигается выбором продолжительности интервалов свободной эволюции  $\tau_1$  и  $\tau_2$ .

Зависимости ошибки (4.8) от  $q/\Omega$  и  $\theta$  для простого и составного неселективных РЧ-импульсов показаны на рис. 5 для спинов разной величины. Для простого импульса зависимость от  $q/\Omega$  линейная, для составного — квадратичная. Зависимость  $\Delta$  от угла  $\theta$  для простого импульса близка к линейной, тогда как для составного импульса такая зависимость практически отсутствует. Кроме того, при увеличении  $I$  ошибка растет из-за усиления квадрупольного взаимодействия. Качественно зависимости ошибок от этих параметров можно выразить следующими формулами соответственно для простого и составного импульсов:

$$\Delta_p = qt_p I(I+1) f_p, \quad (\text{П.7})$$

$$\Delta_c = q^2 t_c^2 I^2 (I+1)^2 f_c, \quad (\text{П.8})$$

где  $f_p$  и  $f_c$  — функции, близкие к константам, при  $\Omega/I(I+1) > 5q$  практически не зависящие от  $\Omega$  и слабо (около 10 %) зависящие от параметров  $d$  и  $\theta$ . Так, например, при  $\theta = \pi/2$  и при изменении  $d$  от 3 до 6 функция  $f_c$  принимает значения  $1.11 \cdot 10^{-3}$ ,

$1.33 \cdot 10^{-3}$ ,  $1.10 \cdot 10^{-3}$ ,  $0.9 \cdot 10^{-3}$ , а  $f_p$  — 0.1, 0.099, 0.093, 0.087. Ошибка растет при увеличении длительностей импульсов  $t_p$  и  $t_c$ , которые обратно пропорциональны амплитуде РЧ-поля:

$$t_p = \theta/\Omega, \quad t_c = a(\theta)/\Omega. \quad (\text{П.9})$$

Зависимость  $a(\theta)$  определяется формулами (4.4), (4.5) и показана на рис. 6. Если  $t_p$  линейно зависит от угла  $\theta$ , то зависимость  $t_c$  значительно слабее, поскольку главный вклад в его величину составляют длительности двух  $3\pi/2$ -импульсов и одного  $\pi/2$ -импульса.

Соотношение (П.1) позволяет добиться обращения знака перед квадрупольным взаимодействием в эффективном гамильтониане. С этой целью перепишем его в виде

$$-q \left[ I_z^2 - \frac{I(I+1)}{3} \right] = q \left[ I_x^2 + I_y^2 - \frac{2I(I+1)}{3} \right]$$

и изменим в соответствии с этим условия (П.5). В этом случае, подставив в формулу (4.4)  $\psi_1 = \pi/2$ ,  $\psi_2 = 0$  и

$$\tau_2 = \tau_1 = t + \frac{\pi}{\Omega}, \quad (\text{П.10})$$

можно получить  $-tH_q$ .

Для уменьшения ошибки симметризуем последовательность по примеру известной сужающей последовательности WHN-4 [14]

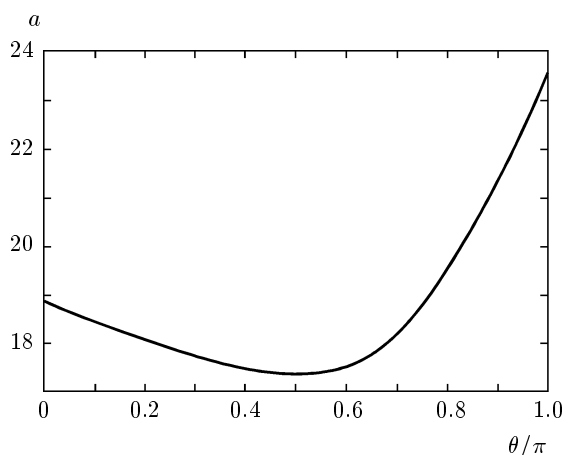


Рис. 6. Зависимость от угла  $\theta$  параметра  $a$ , определяющего в формуле (П.9) длительность составного неселективного РЧ-импульса

$$P_x\left(\frac{\pi}{2}\right) - \tau_1 - P_y\left(\frac{3\pi}{2}\right) - \tau_2 - P_y\left(\frac{\pi}{2}\right) - \tau_1 - P_x\left(\frac{3\pi}{2}\right), \quad (\text{П.11})$$

где  $2\tau_1 = t - \pi/\Omega$ ,  $\tau_2 = t$ . Здесь для устранения ошибки от конечной длительности мы применили два  $3\pi/2$ -импульса, вместо одинакового увеличения угла поворота всех импульсов до  $\beta > \pi/2$ , предложенного в работе [14]. Наш подход позволяет получить универсальные условия для  $\tau_1$  и  $\tau_2$  вместо необходимости решения трансцендентного уравнения для  $\beta$  всякий раз при изменении  $t$  и  $\Omega$ . Были предложены и другие последовательности для обращения времени [15, 19]. При достаточно большой амплитуде  $\Omega$  основной вклад в ошибку происходит из-за некоммутируемости  $(I_x)^2$  и  $(I_y)^2$  при  $I > 1$ . Эту ошибку можно устранить по формуле Троттер–Сузуки, разбивая  $t$  на  $N$  участков.

## ЛИТЕРАТУРА

1. К. А. Валиев, А. А. Кокин, *Квантовые компьютеры: надежды и реальность*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевск (2001).
2. А. Л. Фрадков, О. А. Якубовский (ред.), *Управление молекулярными и квантовыми системами*, Институт компьютерных исследований, Москва–Ижевск (2003).
3. А. Р. Кессель, В. Л. Ермаков, *Письма в ЖЭТФ* **70**, 59 (1999); **71**, 443 (2000).
4. A. Muthukrishnan and C. R. Stroud, Jr., *Phys. Rev. A* **62**, 052309 (2000).
5. A. K. Khitrin and B. M. Fung, *Phys. Rev. A* **64**, 032306 (2001).
6. R. Das, A. Mitra, V. Kumar, and A. Kumar, *Int. J. Quant. Inf.* **1**, 387 (2003).
7. R. Das and A. Kumar, *Phys. Rev. A* **68**, 032304 (2003).
8. A. B. Klimov, R. Guzman, J. C. Retamal, and C. Saavedra, *Phys. Rev. A* **67**, 062313 (2003).
9. G. K. Brennen, D. P. O’Leary, and S. S. Bullock, *Phys. Rev. A* **71**, 052318 (2005).
10. В. Е. Зобов, А. С. Ермилов, *Письма в ЖЭТФ* **83**, 539 (2006).
11. А. С. Ермилов, В. Е. Зобов, *Опт. и спектр.* **103**, 994 (2007).
12. M. D. Bowdrey and J. A. Jones, *Phys. Rev. A* **74**, 052324 (2006).
13. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 260 (2007).
14. У. Хеберлен, М. Меринг, *ЯМР высокого разрешения в твердых телах*, Мир, Москва (1980).
15. Р. Эрнст, Д. Боденхаузен, А. Вокаун, *ЯМР в одном и двух измерениях*, Мир, Москва (1990).
16. M. H. Levitt, D. Suter, and R. R. Ernst, *J. Chem. Phys.* **80**, 3064 (1984).
17. Ч. Сликтер, *Основы теории магнитного резонанса*, Мир, Москва (1981).
18. N. Hatano and M. Suzuki, arXiv:math-ph/0506007.
19. W.-K. Rhim, A. Pines, and J. S. Waugh, *Phys. Rev. B* **3**, 684 (1971).