

ЭВОЛЮЦИЯ И ПЕРЕНОС КОГЕРЕНТНОСТЕЙ С ВОССТАНОВЛЕНИЕМ НАЧАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ ПЕРЕДАТЧИКА

Э. Б. Фельдман*, А. И. Зенчук**

*Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 31 июля 2017 г.

Эволюция квантовых когерентностей ограничена набором законов сохранения при условии, что управляющий этой эволюцией гамильтониан сохраняет число возбужденных спинов. При этом когерентности не перемешиваются в течение эволюции. Используя линию передачи и приемник в основном начальном состоянии, можно передать невзаимодействующие когерентности на приемник. Существенно, что матричные элементы, вносящие вклад в каждую когерентность, перемешиваются в состоянии приемника. Предлагается способ распутывания этих элементов на основе унитарного преобразования приемника (расширенного приемника) и, таким образом, восстановления (по крайней мере, частично) структуры начальной матрицы плотности передатчика. В качестве примера использования предлагаемого метода рассмотрена коммуникационная линия с двухкубитными передатчиком и приемником.

DOI: 10.7868/S0044451017120070

1. ВВЕДЕНИЕ

Многоквантовая (МК) динамика ЯМР является основным инструментом хорошо развитой МК спектроскопии ЯМР, изучающей распределение ядерных спинов в различных системах [1, 2]. По сути, работая с поляризацией спинов, мы имеем дело с диагональными элементами матрицы плотности. Однако метод МК ЯМР позволяет расщепить полную N -кубитную матрицу плотности на $N + 1$ частей, причем каждая из этих частей вносит вклад в соответствующую наблюдаемую величину, называемую интенсивностью когерентности. Таким образом, изучение интенсивностей когерентностей и методы манипуляции ими становятся важным направлением развития методов МК ЯМР. Например, проблема релаксации МК когерентностей изучена в работах [3–7]. Аналогичная проблема в нанопоре рассмотрена в работе [8].

В МК-экспериментах ЯМР с помощью специальной последовательности радиочастотных магнитных импульсов создается так называемый

2-спиновый/2-квантовый гамильтониан (H_{MQ}), который является несекулярной частью гамильтониана диполь-дипольного взаимодействия, усредненного по быстрым осцилляциям [1]. В приближении взаимодействий ближайших соседей было показано, что гамильтониан H_{MQ} можно свести к флип-флоп XX -гамильтониану (H_{XX}) [9] с помощью унитарного преобразования [2]. Заметим, что H_{MQ} не коммутирует с z -проекцией I_z полного спинового момента, в то время как $[H_{XX}, I_z] = 0$.

В данной работе рассматривается проблема эволюции созданных МК-когерентностей. Поэтому после создания когерентностей облучение спиновой системы выключается и когерентности начинают эволюционировать независимо под управлением гамильтониана, коммутирующего с I_z (например, это может быть гамильтониан H_{dz} [10, 11] или флип-флоп-гамильтониан H_{XX}). Мы покажем, что когерентности не взаимодействуют друг с другом в процессе эволюции под управлением гамильтониана, сохраняющего z -проекцию полного спинового момента. Этот факт порождает набор законов сохранения, связанных с такой динамикой, а именно, сохраняются интенсивности когерентностей произвольного порядка. Однако элементы матрицы плотности, вносящие вклад в когерентность одного и того же порядка, перепутываются.

* E-mail: efeldman@icp.ac.ru

** E-mail: zenchuk@itp.ac.ru

Кроме того, когерентности, созданные в некоторой подсистеме (передатчике), можно перенести к другой подсистеме (приемнику) посредством линии передачи, исключая взаимодействия между когерентностями, если только начальное состояние подсистемы приемник + линия передачи имеет когерентность только нулевого порядка. Этот процесс можно рассматривать как частную реализацию удаленного создания состояний в спиновых системах [12, 13]. Показано, что элементы начальной матрицы плотности передатчика могут быть распутаны в матрице плотности приемника с помощью метода, основанного на унитарном преобразовании матрицы плотности приемника, или, более эффективно, расширенного приемника. Мы приводим конкретную модель коммуникационной линии с двухкубитными передатчиком и приемником. Заметим, что расширенный приемник уже использовался в предыдущей работе по удаленному созданию состояний [14] с целью осуществить необходимую коррекцию созданного состояния приемника и улучшить характеристики создаваемого удаленного состояния [12, 13].

Статья имеет следующую структуру. В разд. 2 мы выделим матрицы $\rho^{(n)}$, отвечающие за создание когерентностей порядка n , и изучим экстремальные значения интенсивностей когерентностей. Эволюция интенсивностей когерентностей рассматривается в разд. 3. Перенос когерентностей от передатчика к приемнику изучается в разд. 4. В разд. 5 результаты предыдущих разделов применены к конкретной модели коммуникационной линии с двухкубитными передатчиком и приемником. Полученные результаты кратко обсуждаются в разд. 6.

2. МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ И КОГЕРЕНТНОСТИ

Известно (например, см. [15]), что матрицу плотности N -кубитного квантового состояния можно представить в виде суммы,

$$\rho = \sum_{n=-N}^N \rho^{(n)}, \tag{1}$$

в которой каждая матрица $\rho^{(n)}$ состоит из элементов матрицы ρ , отвечающих за переходы между спиновыми состояниями с изменением z -проекции полного спинового момента на n . Эти элементы вносят вклад в так называемую интенсивность когерентности I_n порядка n , которую можно регистрировать методами МК ЯМР. Чтобы выделить элементы матрицы плотности, вносящие вклад в коге-

рентность порядка n , обратимся к представлению матрицы плотности в мультипликативном базисе:

$$|i_1 \dots i_N\rangle, \quad i_k = 0, 1, \quad k = 1, \dots, N, \tag{2}$$

где i_k означает состояние k -го спина. Таким образом, преобразование из вычислительного базиса в мультипликативный имеет вид

$$\begin{aligned} \rho_{ij} &= \rho_{i_1 \dots i_N; j_1 \dots j_N}, \quad i = \sum_{n=1}^N i_n 2^{n-1} + 1, \\ j &= \sum_{n=1}^N j_n 2^{n-1} + 1. \end{aligned} \tag{3}$$

Тогда, согласно определению,

$$\begin{aligned} I_n(\rho) &= \text{Tr} \left(\rho^{(n)} \rho^{(-n)} \right) = \\ &= \sum_{\sum_k (j_k - i_k) = n} |\rho_{i_1 \dots i_N; j_1 \dots j_N}|^2, \quad |n| \leq N. \end{aligned} \tag{4}$$

2.1. Экстремальные значения интенсивностей когерентностей

Прежде всего найдем экстремальные значения интенсивности когерентности нулевого порядка матрицы ρ при условии отсутствия всех остальных когерентностей, так что $\rho = \rho_0$. По определению (4)

$$\begin{aligned} I_0 &= \text{Tr} (\rho_0 \rho_0) = \text{Tr} (U_0 \Lambda_0 U_0^+) ^2 = \\ &= \text{Tr} \Lambda_0^2 = \sum_{i=1}^{2^N} \lambda_{0i}^2, \end{aligned} \tag{5}$$

где $\Lambda_0 = \text{diag}(\lambda_{01}, \dots, \lambda_{02^N})$ и U_0 – матрицы соответственно собственных чисел и собственных векторов матрицы ρ . Следовательно, нужно найти экстремум интенсивности I_0 при нормировочном условии $\sum_{i=1}^{2^N} \lambda_{0i} = 1$. Вводя множитель Лагранжа α , сведем задачу к нахождению экстремума функции

$$\tilde{I}_0 = \sum_{i=1}^{2^N} \lambda_{0i}^2 - \alpha \left(\sum_{i=1}^{2^N} \lambda_{0i} - 1 \right). \tag{6}$$

Взяв производную по λ_{0i} и приравняв результат к нулю, получим систему уравнений

$$2\lambda_{0i} = \alpha, \quad i = 1, \dots, 2^N, \tag{7}$$

откуда $\lambda_{0i} = \alpha/2$. Используя нормировку, найдем $\alpha = 1/2^{N-1}$ и $\lambda_{0i} = 1/2^N$. Вторая производная функции \tilde{I}_0 указывает на то, что экстремум является минимумом. Таким образом, имеем

$$I_0^{min} = \frac{1}{2^N}, \quad \rho|_{I_0^{min}} = \frac{1}{2^N} E, \quad (8)$$

где E — единичная матрица $2^N \times 2^N$. Чтобы найти максимальное значение I_0 , заметим, что

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{2^N} \lambda_{0i}^2 &= \left(\sum_{i=1}^{2^N} \lambda_{0i} \right)^2 - \sum_{i \neq j} \lambda_{0i} \lambda_{0j} = \\ &= 1 - \sum_{i \neq j} \lambda_{0i} \lambda_{0j} \leq 1. \end{aligned} \quad (9)$$

Очевидно, единицу можно получить, только если имеется всего одно ненулевое собственное значение $\lambda_{01} = 1$. Таким образом,

$$I_0^{max} = 1, \quad \rho|_{I_0^{max}} = \text{diag}(1, \underbrace{0, 0, \dots, 0}_{2^N-1}). \quad (10)$$

Теперь перейдем к анализу интенсивности когерентности порядка n для матрицы, имеющей только три ненулевые когерентности порядков 0 и $\pm n$, предполагая, что интенсивность когерентности нулевого порядка I_0 минимальна, т. е.

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2^N} E + \tilde{\rho}^{(n)} = U_n \left(\frac{1}{2^N} E + \Lambda_n \right) U_n^+, \\ \tilde{\rho}^{(n)} &= \rho^{(n)} + \rho^{(-n)}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\Lambda_n = \text{diag}(\lambda_{n1}, \dots, \lambda_{n2^N})$ и U_n — матрицы соответственно собственных чисел и собственных векторов матрицы $\tilde{\rho}^{(n)}$. Конечно, в этом случае U_n является матрицей собственных векторов и для всей матрицы ρ , при этом

$$\sum_{i=1}^{2^N} \lambda_{ni} = 0. \quad (12)$$

Теперь докажем одно интересное свойство собственных чисел для рассматриваемого случая.

Предложение 1. Собственные числа λ_{ni} появляются парами:

$$\lambda_{n(2i-1)} = \eta_{ni}, \quad \lambda_{n(2i)} = -\eta_{ni}, \quad (13)$$

$$i = 1, \dots, 2^{N-1}.$$

Доказательство. Сначала покажем, что нечетные степени матрицы $\tilde{\rho}^{(n)}$ бесследовые, как и сама матрица. Например, покажем, что

$$\text{Tr}[(\tilde{\rho}^{(n)})^3] = \sum_{i,j,k} \tilde{\rho}_{ij}^{(n)} \tilde{\rho}_{jk}^{(n)} \tilde{\rho}_{ki}^{(n)} = 0. \quad (14)$$

Используя мультипликативный базис для элементов матрицы плотности в правой части уравнения (14), заметим, что ненулевыми будут только такие элементы $\tilde{\rho}_{ij}$, $\tilde{\rho}_{jk}$, $\tilde{\rho}_{ki}$, для которых соответственно

$$\begin{aligned} \sum_m i_m - \sum_m j_m &= \pm n, \quad \sum_m j_m - \sum_m k_m = \pm n, \\ \sum_m k_m - \sum_m i_m &= \pm n. \end{aligned}$$

Однако, просуммировав все эти равенства, получим тождественный нуль в левой части и $\pm 3n$ или $\pm n$ в правой. Это противоречие означает наличие нулевых матричных элементов в каждом члене суммы (14), т. е. след равен нулю.

Аналогичное рассуждение справедливо и для высших нечетных степеней матрицы $\tilde{\rho}^{(n)}$ (однако сумма $\tilde{\rho}^{(n)} + \tilde{\rho}^{(k)}$, $k \neq n$ не обладает этим свойством, т. е. в общем случае след любой ее степени ненулевой). Следовательно, кроме (12) для любого нечетного m справедливы равенства

$$\sum_{i=1}^{2^N} \lambda_{ni}^m = 0. \quad (15)$$

Условие (15) выполняется для любой нечетной степени m , если только собственные значения λ_{ni} появляются парами (13). Чтобы доказать это утверждение, сначала предположим, что все собственные числа не вырождены. Пусть λ_{n1} — максимальное по модулю собственное число. Разделим сумму (15) на λ_{n1}^m для нечетных m :

$$1 + \sum_{i=2}^{2^N} \left(\frac{\lambda_{ni}}{\lambda_{n1}} \right)^m = 0. \quad (16)$$

Каждый член в сумме не может превысить единицу по абсолютной величине. Возьмем теперь предел $m \rightarrow \infty$ в уравнении (16). Ясно, что все члены, такие что $|\lambda_{ni}/\lambda_{n1}| < 1$, обращаются в нуль. Поскольку сумма равна нулю, должно существовать собственное число λ_{n2} , такое что $\lambda_{n2} = -\lambda_{n1}$. Тогда соответствующий член в (16) дает -1 . Таким образом, первые два члена в сумме (16) уничтожают друг друга, поэтому уравнение (16) для нечетных m сводится к

$$\sum_{i=3}^{2^N} \lambda_{ni}^m = 0. \quad (17)$$

Далее, выделяя максимальное (по модулю) из оставшихся собственных чисел, повторим наши рассуждения и придем к выводу о существовании еще двух

собственных чисел, равных по модулю и имеющих противоположные знаки и т. д. Наконец, после 2^{N-1} шагов заключаем, что все ненулевые собственные числа появляются парами (13).

Пусть $(2k + 1)$ -е собственное число на $(2k + 1)$ -м шаге является s -кратным, т. е. $\lambda_{n(2k+1)} = \dots = \lambda_{n(2k+s)}$. Тогда сумма (15) принимает вид

$$\sum_{i=2k+1}^{2^N} \left(\frac{\lambda_{ni}}{\lambda_{n(2k+1)}} \right)^m = s + \sum_{i=2k+s+1}^{2^N} \left(\frac{\lambda_{ni}}{\lambda_{n(2k+1)}} \right)^m, \quad (18)$$

$s \in \mathbb{N}, \quad s \leq N - 2k, \quad m - \text{нечетно.}$

Теперь, чтобы компенсировать s , нужно s -кратное собственное число, такое что $\lambda_{n(2k+s+1)} = \dots = \lambda_{n(2k+2s)} = -\lambda_{n(2k+1)}$. Таким образом, если существует s -кратное положительное собственное число, то должно быть и s -кратное отрицательное собственное число. Это заканчивает доказательство. \square

Далее, поскольку все собственные числа матрицы ρ должны быть неотрицательными и матрица плотности ρ имеет структуру (11), отрицательные собственные числа η_{ni} не могут превышать $1/2^N$ по модулю. Поэтому максимальная интенсивность когерентности порядка n соответствует случаю

$$\eta_{ni} = \frac{1}{2^N}. \quad (19)$$

Следовательно,

$$I_n^{max} + I_{-n}^{max} = 2I_n^{max} = \sum_{j=1}^{N_n} \lambda_{ni}^2 = \frac{N_n}{2^{2N}} \leq \frac{1}{2^N}, \quad (20)$$

где $I_n^{max} = I_{-n}^{max}$, а N_n — число ненулевых собственных чисел матрицы $\tilde{\rho}^{(n)}$. Это число равняется рангу матрицы $\tilde{\rho}^{(n)}$, который, в свою очередь, можно найти следующим образом.

Предложение 2. Ранг матрицы $\tilde{\rho}^{(n)}$ вычисляется по формуле

$$N_n = \text{ran } \tilde{\rho}^{(n)} = \sum_{k=0}^N \min \left(\binom{N}{k}, \binom{N}{k+n} + \binom{N}{k-n} \right), \quad (21)$$

в которой биномиальные коэффициенты $\binom{N}{m} = 0$ при $m < 0$.

Доказательство. Для когерентности порядка n число состояний с k возбужденными спинами равно $\binom{N}{k}$. Когерентность порядка $\pm n$ собирает элементы матрицы ρ , ответственные за переходы из состояний с k возбужденными спинами в состояния с $k \pm n$ возбужденными спинами. Всего существует $\binom{N}{k+n} + \binom{N}{k-n}$ таких переходов. Эти переходы можно объединить в матрицу из $\binom{N}{k}$ столбцов и $\binom{N}{k+n} + \binom{N}{k-n}$ строк, максимальный ранг которой равен

$$\min \left(\binom{N}{k}, \binom{N}{k+n} + \binom{N}{k-n} \right).$$

Очевидно, ранг матрицы $\tilde{\rho}^{(n)}$ равен сумме вычисленных рангов при различных $k = 0, \dots, N$, т. е. приходим к формуле (21). \square

Следствие. Для интенсивности когерентности первого порядка ($n = 1$) из уравнения (21) получим

$$N_1 = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} = 2^N. \quad (22)$$

Доказательство. Нужно показать, что в этом случае

$$\binom{N}{k} \leq \binom{N}{k+1} + \binom{N}{k-1}, \quad 0 \leq k \leq N. \quad (23)$$

Рассмотрим сначала случай $k > 1$ и $k < N$. Тогда

$$\begin{aligned} \binom{N}{k+1} + \binom{N}{k-1} &= \\ &= \binom{N}{k} \left(\frac{N-k}{k+1} + \frac{k}{N-k+1} \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Покажем, что выражение внутри скобок больше или равно единице. После простых преобразований это условие приобретает вид

$$3k^2 - 3Nk + N^2 - 1 \geq 0, \quad (25)$$

где левая часть является квадратичным выражением по k . Это выражение имеет корни

$$k_{1,2} = \frac{3N \pm \sqrt{12 - 3N^2}}{6}, \quad (26)$$

которые являются мнимыми при $N > 2$. Поэтому парабола $3k^2 - 3Nk + N^2$ лежит в верхней полуплоскости k при $N > 2$ и, следовательно, условие

Таблица. Максимальные интенсивности когерентностей I_n^{max} порядка n и ранги N_n матрицы $\tilde{\rho}^{(n)}$ при различном числе узлов N в системе спинов

	N													
	2		3			4				5				
n	1	2	1	2	3	1	2	3	4	1	2	3	4	5
N_n	4	2	8	4	2	16	12	4	2	32	24	14	4	2
$2I_n^{max}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{3}{64}$	$\frac{1}{64}$	$\frac{1}{128}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{3}{128}$	$\frac{7}{512}$	$\frac{1}{256}$	$\frac{1}{512}$

(25) выполняется при $N \geq 2$. В нашем случае минимальное значение N равняется 2, что соответствует однокубитному передатчику и однокубитному приемнику без передающей линии между ними.

Если $k = 1$, то вместо (24) имеем

$$\binom{N}{2} + \binom{N}{0} = \binom{N}{2} + 1 = \binom{N}{1} \frac{N-1}{2} + 1 \geq \binom{N}{1}, \quad N \in \mathbb{N}. \quad (27)$$

Поэтому условие (23) тоже удовлетворено.

Если $k = 0$, то $\binom{N}{1} = 1$ и

$$\binom{N}{1} + \binom{N}{-1} = \binom{N}{1} > \binom{N}{0}, \quad (28)$$

поэтому условие (23) тоже выполнено.

Аналогично можно рассмотреть случай $k = N$. \square

Таким образом, N_1 равняется максимально возможному рангу $N_1 = \text{ran } \tilde{\rho}^{(1)}$, так что $2I_1^{max} = 1/2^N$. Аналогично, для когерентности порядка N существуют только два ненулевых члена в (14), которые приводят к $N_N = 2$ и $2I_N^{max} = 1/2^{2N-1}$. Для интенсивностей когерентностей других порядков мы не можем привести аналогичный результат при любом N . Максимальные интенсивности когерентностей порядка n ($n > 0$) при $N = 2, \dots, 5$ приведены в таблице. Эта таблица демонстрирует упорядочение интенсивностей I_n^{max} :

$$I_0^{max} > I_1^{max} > \dots > I_N^{max}. \quad (29)$$

Что касается минимума интенсивности когерентности любого ненулевого порядка, его значение очевидно:

$$I_n^{min} = 0. \quad (30)$$

3. ЭВОЛЮЦИЯ КОГЕРЕНТНОСТЕЙ

3.1. Законы сохранения

Прежде всего напомним известный закон сохранения, справедливый для любой эволюционирующей квантовой системы.

Предложение 3. Сумма интенсивностей всех когерентностей сохраняется:

$$\frac{d}{dt} \sum_{n=-N}^N I_n = \frac{d}{dt} \text{Tr} (\rho^{(n)} \rho^{(-n)}) = 0. \quad (31)$$

Доказательство. Рассмотрим уравнение Лиувилля

$$i \frac{d\rho}{dt} = [\rho, H]. \quad (32)$$

Используя это уравнение, получим

$$i \text{Tr} \frac{d\rho^2}{dt} = \text{Tr} [\rho^2, H] = 0. \quad (33)$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho^2 &= \text{Tr} \left(\sum_{n=-N}^N \rho^{(n)} \rho^{(-n)} \right) = \\ &= \sum_{n=-N}^N \text{Tr} (\rho^{(n)} \rho^{(-n)}) = \sum_{n=-N}^N I_n \equiv \text{const}, \end{aligned} \quad (34)$$

что эквивалентно уравнению (31). \square

Кроме того, если эволюция системы управляется гамильтонианом, коммутирующим с I_z ,

$$[H, I_z] = 0, \quad (35)$$

то существует семейство законов сохранения, которое можно охарактеризовать следующим образом.

Следствие. Если справедливо условие (35), то сохраняются интенсивности всех когерентностей, т. е.

$$\frac{dI_n}{dt} = 0, \quad |n| \leq N. \quad (36)$$

Доказательство. Из уравнения (32) имеем

$$i\rho^{(n)}\frac{d\rho}{dt} + i\frac{d\rho}{dt}\rho^{(-n)} = \rho^{(n)}[H, \rho] + [H, \rho]\rho^{(-n)}. \quad (37)$$

След этого уравнения имеет вид

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(i\rho^{(n)}\frac{d\rho}{dt} + i\frac{d\rho}{dt}\rho^{(-n)} \right) &= 2i\frac{d}{dt}\text{Tr}(\rho^{(n)}\rho^{(-n)}) \equiv \\ &\equiv 2i\frac{dI_n}{dt} = \text{Tr}(\rho^{(n)}H\rho - \rho H\rho^{(n)}) - \\ &- \text{Tr}(\rho H\rho^{(-n)} - \rho^{(-n)}H\rho). \end{aligned} \quad (38)$$

Проведем под знаком следа (38) унитарное преобразование $e^{i\phi I_z}$ (ϕ — действительный параметр). Используя разложение (1) для ρ и коммутационное соотношение (35), получим

$$\begin{aligned} &\text{Tr} \left(e^{i\phi I_z} (\rho^{(n)}H\rho - \rho H\rho^{(n)}) e^{-i\phi I_z} \right) - \\ &- \text{Tr} \left(e^{i\phi I_z} (\rho H\rho^{(-n)} - \rho^{(-n)}H\rho) e^{-i\phi I_z} \right) = \\ &= \sum_{k=-N}^N \left[\text{Tr} \left(e^{i\phi(n+k)} (\rho^{(n)}H\rho^{(k)} - \rho^{(k)}H\rho^{(n)}) \right) - \right. \\ &\left. - \text{Tr} \left(e^{i\phi(k-n)} (\rho^{(k)}H\rho^{(-n)} - \rho^{(-n)}H\rho^{(k)}) \right) \right]. \end{aligned} \quad (39)$$

Поскольку этот след не должен зависеть от ϕ , имеем $k = -n$ и $k = n$ соответственно в первом и во втором слагаемом. Поэтому выражение (39) тождественно равно нулю и уравнение (38) порождает набор законов сохранения (36). \square

Равенства (36) представляют собой набор законов сохранения, связанных с динамикой системы спинов под управлением гамильтониана H , коммутирующего с I_z .

3.2. Об отображении $\rho^{(n)}(0) \rightarrow \rho^{(n)}(t)$

Теперь выведем важное следствие из законов сохранения (36), которое описывает зависимость элементов эволюционирующей матрицы $\rho^{(n)}(t)$ от элементов начальной матрицы $\rho^{(n)}(0)$. Прежде всего заметим, что гамильтониан, коммутирующий с I_z , имеет следующую блочную структуру:

$$H = \sum_{l=0}^N H^{(l)}, \quad (40)$$

где блок H_l управляет динамикой состояний с l возбужденными спинами. Тогда любую матрицу $\rho^{(n)}$ можно также представить в виде

$$\rho^{(n)} = \sum_{l=0}^{N-n} \rho^{(l,l+n)}, \quad \rho^{(-n)} = \sum_{l=n}^N \rho^{(l,l-n)}, \quad (41)$$

$$n = 0, 1, \dots, N.$$

Теперь, вводя операторы эволюции

$$V(t) = e^{-iHt}, \quad V^{(l)}(t) = e^{-iH^{(l)}t}, \quad (42)$$

запишем эволюцию матрицы плотности:

$$\begin{aligned} \rho(t) &= V(t)\rho(0)V^\dagger(t) = \sum_{n=-N}^N V(t)\rho^{(n)}(0)V^\dagger(t) = \\ &= \sum_{n=0}^N \sum_{l=0}^{N-n} V^{(l)}(t)\rho^{(l,l+n)}(0)(V^{(l+n)}(t))^\dagger + \\ &+ \sum_{n=-N}^{-1} \sum_{l=n}^N V^{(l)}(t)\rho^{(l,l-n)}(0)(V^{(l-n)}(t))^\dagger. \end{aligned} \quad (43)$$

Поскольку операторы $V^{(l)}$ не меняют число возбуждений, имеем

$$\rho(t) = \sum_{n=-N}^N \rho^{(n)}(t), \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \rho^{(n)}(t) &= \sum_{l=0}^{N-n} V^{(l)}(t)\rho^{(l,l+n)}(0)(V^{(l+n)}(t))^\dagger \equiv \\ &\equiv P^{(n)} \left[t, \rho^{(n)}(0) \right], \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \rho^{(-n)} &= (\rho^{(n)}(t))^\dagger = \sum_{l=n}^N V^{(l)}(t)\rho^{(l,l-n)}(0) \times \\ &\times (V^{(l-n)}(t))^\dagger \equiv P^{(-n)} \left[t, \rho^{(-n)}(0) \right], \end{aligned}$$

где введены линейные операторы эволюции $P^{(n)}$ ($P^{(-n)}$), отображающие матрицу $\rho^{(n)}(0)$ ($\rho^{(-n)}(0)$) в эволюционирующую матрицу $\rho^{(n)}(t)$ ($\rho^{(-n)}(t)$), отвечающую за когерентность того же порядка n ($-n$), т. е. оператор $P^{(n)}$, примененный к матрице когерентности порядка n , не порождает когерентностей других порядков. Заметим, что, в некотором смысле, формулы (45) аналогичны представлению Ливилля [16]. Далее для простоты мы не пишем t в списке аргументов оператора $P^{(n)}$.

4. ПЕРЕНОС КОГЕРЕНТНОСТЕЙ ОТ ПЕРЕДАТЧИКА К ПРИЕМНИКУ

4.1. Перенос состояний как отображение

$$\rho^{(S)}(0) \rightarrow \rho^{(R)}(t)$$

Рассмотрим теперь процесс переноса когерентностей от M -кубитного передатчика (S) к M -кубитному приемнику (R), которые соединены линией передачи (TL). Матрица плотности приемника имеет вид

$$\rho^{(R)}(t) = \text{Tr}_{/R} \rho(t) = \sum_{n=-M}^M \rho^{(R;n)}(t), \quad (46)$$

где след берется по всем узлам квантовой системы за исключением приемника и $\rho^{(R;n)}$ означает под-

матрицу матрицы $\rho^{(R)}$, вносящую вклад в когерентность порядка n .

Рассмотрим теперь начальное состояние в виде тензорного произведения:

$$\rho(0) = \rho^{(S)}(0) \otimes \rho^{(TL,R)}(0). \quad (47)$$

Очевидно,

$$\rho^{(n)}(0) = \sum_{n_1+n_2=n} \rho^{(S;n_1)}(0) \otimes \rho^{(TL,R;n_2)}(0), \quad (48)$$

где $\rho^{(S;n_i)}$ и $\rho^{(TL,R;n_i)}$ — матрицы, вносящие вклад в когерентность порядка n_i соответственно матриц $\rho^{(S)}$ и $\rho^{(TL)}$. Используя разложения (44) и операторы $P^{(n)}$, заданные выражениями (45), запишем

$$\rho^{(R)} = \text{Tr}_{/R} \sum_{n=-N}^N P^{(n)} [\rho^{(n)}(0)] = \text{Tr}_{/R} \sum_{n=-N}^N \sum_{n_1+n_2=n} P^{(n)} [\rho^{(S;n_1)}(0) \otimes \rho^{(TL,R;n_2)}(0)]. \quad (49)$$

Далее нам потребуется следующее предложение.

Предложение 4. Частичный след матрицы ρ не смешивает когерентности различных порядков и, кроме того,

$$\text{Tr}_{/R} \rho^{(n)} = 0, \quad |n| > M. \quad (50)$$

Доказательство. Разделим полный мультипликативный базис квантового состояния на 2^M -мерный подбазис $B^{(R)}$ состояний приемника и 2^{N-M} -мерный подбазис состояний подсистемы, состоящей из передатчика и линии передачи $B^{(S,TL)}$, т. е. $|i\rangle = |i^{S,TL}\rangle \otimes |i^R\rangle$. Тогда элементы матрицы плотности ρ нумеруются двойными индексами $i = (i^{S,TL}, i^R)$ и $j = (j^{S,TL}, j^R)$, т. е.

$$\rho_{ij} = \rho_{(i^{S,TL}, i^R), (j^{S,TL}, j^R)}. \quad (51)$$

При этом уравнение (46) в покомпонентной записи имеет вид

$$\rho_{i^R, j^R}^{(R)} = \text{Tr}_{/R} \rho = \sum_{i^{S,TL}} \rho_{(i^{S,TL}, i^R), (i^{S,TL}, j^R)}. \quad (52)$$

Поэтому когерентности матрицы $\rho^{(R)}$ образуются только переходами в подпространстве с базисом $B^{(R)}$. Следовательно, матрица $\rho^{(R;n)}$, формирующая когерентность приемника порядка n , состоит из элементов, входящих в когерентность порядка n всей квантовой системы. Таким образом, след не перемешивает когерентности.

Поскольку приемник является M -кубитной подсистемой, он может образовать только когерентности такого порядка n , что $|n| \leq M$ в соответствии с условием (50). \square

Это предложение позволяет прийти к выводу, что

$$\begin{aligned} \rho^{(R;n)} &= \\ &= \text{Tr}_{/R} \sum_{n_1+n_2=n} P^{(n)} [\rho^{(S;n_1)}(0) \otimes \rho^{(TL,R;n_2)}(0)], \\ & \quad |n| \leq M. \end{aligned} \quad (53)$$

Из формулы (53) следует, что в общем случае в когерентностях любого порядка матрицы плотности приемника $\rho^{(R)}$ перемешаны все когерентности $\rho^{(S;n)}$. Однако это не так, если начальное состояние $\rho^{(TL,R)}(0)$ состоит из элементов, которые вносят вклад только в когерентность нулевого порядка. Тогда формула (53) приобретает вид

$$\rho^{(R;n)} = \text{Tr}_{/R} \left(P^{(n)} [\rho^{(S;n)}(0) \otimes \rho^{(TL,R;0)}(0)] \right), \quad (54) \quad |n| \leq M.$$

В этом случае элементы, вносящие вклад в когерентность порядка n матрицы $\rho^{(S)}(0)$, дают вклад только в когерентность порядка n матрицы $\rho^{(R)}(t)$.

4.2. Восстановление состояния передатчика в приемнике

В разд. 4.1 показано, что хотя когерентности начального состояния передатчика разделены нужным образом в состоянии приемника, элементы, вносящие вклад в когерентность порядка n матрицы $\rho_0^{(S)}$, перемешаны в матрице $\rho_n^{(R)}$. Но мы хотим разделить элементы матрицы $\rho_0^{(S)}$ в матрице $\rho^{(R)}(t)$, так что в идеальном случае

$$\begin{aligned} \rho_{ij}^{(R)}(t) &= f_{ij}(t)\rho_{ij}^{(S)}, \quad (i, j) \neq (2^M, 2^M), \\ \rho_{2^M 2^M}^{(R)}(t) &= 1 - \sum_{i=1}^{2^M-1} f_{ii}(t)\rho_{ii}^{(S)}. \end{aligned} \quad (55)$$

Назовем состояние с элементами, удовлетворяющими условиям (55), полностью восстановленным состоянием. Возможно, соотношения (55) нельзя реализовать для всех элементов матрицы $\rho^{(R)}$, другими словами, полное восстановление состояния передатчика невозможно в общем случае. Однако простым случаем полного восстановления является перенос однокубитного состояния передатчика на однокубитный приемник, поскольку в этом случае существует только один элемент $\rho_{12}^{(S)}$ в матрице $\rho^{(S)}$, вносящий вклад в когерентность первого порядка матрицы $\rho^{(R)}$, и один независимый элемент $\rho_{11}^{(S)}$, вносящий вклад в когерентность нулевого порядка. Кроме того, можно заметить, что когерентности найвысшего (по модулю) порядка в общем случае имеют вид (55), поскольку существует только один элемент матрицы плотности, вносящий вклад в когерентности порядка $\pm M$. Что касается других когерентностей, можно попытаться частично восстановить по крайней мере некоторые элементы с помощью локального унитарного преобразования состояния приемника (расширенного приемника).

4.2.1. Унитарное преобразование расширенного приемника как метод восстановления состояния

Итак, унитарное преобразование приемника можно использовать для (частичного) восстановления начального состояния передатчика $\rho^{(S)}(0)$ в матрице плотности $\rho^{(R)}(t)$ в некоторый момент времени t в смысле определения (55). Из простых оценок следует, что число параметров в унитарном преобразовании $U^{(R)}$ самого приемника недостаточно для восстановления всех элементов матрицы плотности $\rho^{(S)}(0)$. Для осуществления полного восстановления нужно увеличить число параметров унитарного преобразования, расширив приемник

до $M^{(ext)} > M$ узлов, и воспользоваться преобразованием $U^{(ext)}$ расширенного приемника для восстановления состояния $\rho^{(S)}(0)$.

Таким образом, рассмотрим $M^{(ext)}$ -мерный расширенный приемник и потребуем, чтобы упомянутое унитарное преобразование не перемешивало матрицы когерентностей различного порядка. Это возможно, если $U^{(ext)}$ коммутирует с z -проекцией полного спинового момента расширенного приемника. В этом случае матрицу $\rho^{(R)}$ можно получить из матрицы ρ в три этапа:

- 1) редукция $\rho(t)$ в матрицу плотности расширенного приемника $\rho^{(R_{ext})}(t)$;
- 2) применение восстанавливающего унитарного преобразования $U^{(ext)}$;
- 3) редукция результирующей матрицы плотности $U^{(ext)}\rho^{(R_{ext})}(t)(U^{(ext)})^\dagger$ в $\rho^{(R)}$. Чтобы найти общий вид унитарного преобразования, рассмотрим это преобразование в базисе, построенном на операторах $I_j^\pm = I_{xj} \pm iI_{yj}$ и I_{zj} . Этот базис имеет следующий вид:

$$B^{(i)} : E, I_{zi}, I_i^+, I_i^- \quad (56)$$

для однокубитной подсистемы (i -й кубит полной квантовой системы);

$$B^{(ij)} = B^{(i)} \otimes B^{(j)} \quad (57)$$

для двухкубитной подсистемы (i -й и j -й кубиты);

$$B^{(ijk)} = B^{(ij)} \otimes B^{(k)} \quad (58)$$

для трехкубитной подсистемы (i -й, j -й и k -й кубиты);

$$B^{(ijklm)} = B^{(ij)} \otimes B^{(klm)} \quad (59)$$

для четырехкубитной подсистемы (i -й, j -й, k -й и m -й кубиты) и т. д. Элементы базиса, коммутирующие с I_z , образованы парами $I_p^+ I_q^-$ и диагональными матрицами I_{zk}, E . Таким образом, однокубитный базис (56) включает в себя два элемента, коммутирующих с I_z :

$$B^{(C;i)} : E, I_{zi}. \quad (60)$$

Двухкубитный базис (57) включает в себя 6 таких элементов:

$$B^{(C;ij)} : E, I_{zi}, I_{zj}, I_{zi}I_{zj}, I_i^+ I_j^-, I_j^+ I_i^-. \quad (61)$$

Трехкубитный базис (58) включает в себя 20 таких элементов:

$$\begin{aligned} B^{(C;ijk)} : E, I_{zp}, I_{zp}I_{zs}, I_{zi}I_{zj}I_{zk}, \\ I_p^+ I_s^-, I_p^+ I_s^- I_{zr}, \quad p, s, r \in \{i, j, k\}, \quad r \neq p \neq s. \end{aligned} \quad (62)$$

Четырехкубитный базис (59) включает в себя 70 таких элементов:

$$\begin{aligned}
 & B^{(C;ijkm)} : E, I_{zp}, I_{zp}I_{zs}, \\
 & I_{zp}I_{zs}I_{zr}, I_{zi}I_{zj}I_{zk}I_{zm}, I_p^+ I_s^-, I_p^+ I_s^- I_{zr}, \\
 & I_p^+ I_s^- I_{zr} I_{zq}, I_p^+ I_s^- I_r^+ I_q^-, \\
 & p, s, r, q \in \{i, j, k, m\}, \quad p \neq s \neq r \neq q, \quad (63)
 \end{aligned}$$

и т. д. Однако существует общая фаза, которая не может влиять на элементы матрицы плотности. Поэтому число параметров в указанных унитарных преобразованиях, которые могут влиять на элементы матрицы плотности, меньше размерности базисов (60)–(63) на единицу.

5. ЧАСТНАЯ МОДЕЛЬ

В качестве частной модели рассмотрим цепочку спинов 1/2 с двухкубитными передатчиком и приемником, а также начальное состояние в виде тензорного произведения

$$\rho(0) = \rho^{(S)}(0) \otimes \rho^{(TL,R)}(0), \quad (64)$$

где $\rho^{(S)}(0)$ — произвольное начальное состояние передатчика и $\rho^{(TL,R)}(0)$ — начальное термодинамически равновесное состояние линии передачи и приемника,

$$\rho^{TL,B} = \frac{e^{bI_z}}{Z}, \quad Z = \left(2 \operatorname{ch} \frac{b}{2}\right)^{N-2}, \quad (65)$$

где $b = 1/kT$, T — температура, а k — постоянная Больцмана. Таким образом, как $\rho^{(S)}$, так и $\rho^{(R)}$ являются матрицами 4×4 .

Пусть эволюция спиновой цепочки осуществляется под управлением XX -гамильтониана H в приближении взаимодействий ближайших соседей [9]:

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} D(I_{ix}I_{(i+1)x} + I_{iy}I_{(i+1)y}), \quad (66)$$

где D — константа связи. Очевидно, $[H, I_z] = 0$. С помощью преобразования Йордана – Вигнера [17, 18] можно получить точную формулу для матрицы плотности двухкубитного приемника (46), но, для краткости, мы не приводим подробностей вывода этой формулы.

Перепишем теперь формулы (53) для вклада в каждую когерентность следующим образом. Для когерентности нулевого порядка имеем

$$\begin{aligned}
 \rho_{ij}^{(R;0)} &= \alpha_{ij;11}\rho_{11}^{(S)} + \alpha_{ij;22}\rho_{22}^{(S)} + \alpha_{ij;33}\rho_{33}^{(S)} + \\
 &+ \alpha_{ij;44}\rho_{44}^{(S)} + \alpha_{ij;23}\rho_{23}^{(S)} + \alpha_{ij;32}(\rho_{23}^{(S)})^*, \quad (67)
 \end{aligned}$$

$$(i, j) = (1, 1), (2, 2), (3, 3), (2, 3),$$

$$\rho_{44}^{(R;0)} = 1 - \sum_{i=1}^3 \rho_{ii}^{(R)}, \quad \alpha_{ii;32} = \alpha_{ii;23}^*.$$

Из (67) следует существование 12 вещественных параметров

$$\alpha_{ii;jj}, \quad i = 1, 2, 3, \quad j = 1, 2, 3, 4$$

и 9 комплексных параметров

$$\alpha_{ii;23}, \quad i = 1, 2, 3, \quad \alpha_{23;ii}, \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad \alpha_{23;23}, \quad \alpha_{23;32},$$

т. е. 30 вещественных параметров. Для когерентности первого порядка имеем

$$\begin{aligned}
 (\rho_1^{(R)})_{ij} &= \alpha_{ij;12}\rho_{12}^{(S)} + \alpha_{ij;13}\rho_{13}^{(S)} + \alpha_{ij;24}\rho_{24}^{(S)} + \\
 &+ \alpha_{ij;34}\rho_{34}^{(S)}, \quad (i, j) = (1, 2), (1, 3), (2, 4), (3, 4). \quad (68)
 \end{aligned}$$

Здесь существуют 16 комплексных параметров, или 32 вещественных. Наконец, для когерентности второго порядка имеем

$$\rho_{14}^{(R)} = \alpha_{14;12}\rho_{14}^{(S)}. \quad (69)$$

В этом случае существует один комплексный параметр (два вещественных). Во всех этих формулах коэффициенты $\alpha_{ij;nm}$ определяются гамильтонианом взаимодействия и зависят от времени t .

5.1. Простой пример восстановления матриц $\rho^{(S;\pm 1)}$

Мы показали, что существуют 64 вещественных параметра, которые мы хотели бы подобрать в уравнениях (67)–(69). Для полного восстановления произвольного состояния нужен расширенный приемник из $M = 4$ узлов. В этом случае число эффективных параметров унитарного преобразования, описанного в разд. 4.2.1, равняется 69. Однако для простоты мы воспользуемся унитарным преобразованием двухкубитного приемника и осуществим полное восстановление матриц $\rho^{(S;\pm 1)}(0)$ специального вида для когерентности порядка ± 1 , а именно,

$$\rho^{(S;1)} + \rho^{(S;-1)} = \begin{pmatrix} 0 & a & a & 0 \\ a^* & 0 & 0 & a \\ a^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a^* & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (70)$$

Унитарное преобразование, построенное в базисе (61), имеет вид

$$U = \exp[i\phi_1(I_1^+ I_2^- + I_1^- I_2^+)] \exp[\phi_2(I_1^+ I_2^- - I_1^- I_2^+)] \times \exp(i\Phi), \quad (71)$$

где $\Phi = \text{diag}(\phi_3, \dots, \phi_6)$ — диагональная матрица, а $\phi_i, i = 1, \dots, 6$ — произвольные вещественные параметры. Уравнения (68) сводятся к следующим:

$$(\rho_1^{(R)})_{ij} = \alpha_{ij} a, \quad \alpha_{ij} = \alpha_{ij;12} + \alpha_{ij;13} + \alpha_{ij;24}, \quad (72)$$

$$(i, j) = (1, 2), (1, 3), (2, 4), (3, 4).$$

Рассмотрим цепочку из $N = 20$ узлов и положим $b = 10$. Выберем момент времени для регистрации состояния в приемнике, максимизируя интенсивность когерентности наивысшего порядка (в нашей модели — когерентность второго порядка), поскольку эта интенсивность имеет наименьшее из максимальных возможных значений согласно упорядочению (29). Этот момент времени найден численно и равен $Dt = 24.407$.

Далее, с помощью параметров ϕ_i унитарного преобразования (71) можно сделать нулевым коэффициент α_{34} и, таким образом, получить полностью восстановленные матрицы $\rho^{(R;\pm 1)}$ в виде

$$\rho^{(R;1)} + \rho^{(R;-1)} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_{12} a & \alpha_{13} a & 0 \\ \alpha_{12}^* a^* & 0 & 0 & \alpha_{24} a \\ \alpha_{13}^* a^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{24}^* a^* & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (73)$$

Приведем соответствующие значения параметров ϕ_i :

$$\phi_1 = 2.41811, \quad \phi_2 = 1.57113, \quad \phi_k = 0, \quad (74)$$

$$k = 2, \dots, 6.$$

При этом

$$\alpha_{12} = 0.00021 + 0.63897i, \quad (75)$$

$$\alpha_{13} = 0.00010 - 0.30585i,$$

$$\alpha_{24} = 0.00010 - 0.30582i.$$

Таким образом, с помощью унитарного преобразования состояния приемника восстановлены начальные матрицы $\rho^{(S;\pm 1)}(0)$ передатчика в смысле определения (55). Этот результат справедлив для произвольных допустимых начальных матриц $\rho^{(S;0)}(0)$ и $\rho^{(S;\pm 2)}(0)$.

6. ВЫВОДЫ

Интенсивности МК-когерентностей являются характеристиками матрицы плотности, которые можно измерить в МК-экспериментах ЯМР. Показана независимость эволюций когерентностей при условии, что динамика спинов управляется гамильтонианом, сохраняющим z -проекцию полного спинового момента. Это важное свойство квантовых когерентностей, которое позволяет сохранять их в том смысле, что семейство элементов матрицы плотности, вносящих вклад в когерентность конкретного порядка, не перемешивается с другими элементами в процессе эволюции. Кроме того, если спиновую систему со сформированными когерентностями (которая называется передатчиком в этом случае) соединить линией передачи с приемником, можно перенести эти когерентности без перемешивания при условии, что начальное состояние $\rho^{(TL,R)}(0)$ имеет только когерентность нулевого порядка.

Разработан метод восстановления состояния, который позволяет (по крайней мере частично) восстановить начальное состояние передатчика. Такое восстановление основано на унитарном преобразовании состояния приемника или расширенного приемника, который используется с целью увеличения числа параметров унитарного преобразования. В качестве простейшего примера выполнено частичное восстановление конкретного начального состояния передатчика в двухкубитном приемнике посредством унитарного преобразования на нем. Примеры восстановления более сложных состояний с привлечением расширенного приемника требуют больших технических затрат и дальнейшего рассмотрения.

Работа частично поддержана Программой РАН «Элементная база квантовых компьютеров», а также РФФИ (гранты №№ 15-07-07928, 16-03-00056).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Baum, M. Munowitz, A. N. Garroway, and A. Pines, *J. Chem. Phys.* **83**, 2015 (1985).
2. С. И. Доронин, И. И. Максимов, Э. Б. Фельдман, *ЖЭТФ* **118**, 687 (2000).
3. H. G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 090501 (2004).
4. H. G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 150503 (2006).

5. G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 230403 (2010).
6. H. J. Cho, P. Cappellaro, D. G. Gory, and C. Ramathanathan, *Phys. Rev. B* **74**, 224434 (2006).
7. G. A. Bochkin, E. B. Fel'dman, S. G. Vasil'ev, and V. I. Volkov, *Chem. Phys. Lett.* **680**, 56 (2017).
8. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, and A. I. Zenchuk, *J. Chem. Phys.* **134**, 034102 (2011).
9. D. C. Mattis, *The Many-Body Problem: An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension*, World Sci., Singapore (1993).
10. A. Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism*, Clarendon, Oxford (1961).
11. M. Goldman, *Spin Temperature and Nuclear Magnetic Resonance in Solids*, Clarendon, Oxford (1970).
12. A. I. Zenchuk, *Phys. Rev. A* **90**, 052302 (2014).
13. G. A. Bochkin and A. I. Zenchuk, *Phys. Rev. A* **91**, 062326 (2015).
14. G. A. Bochkin and A. I. Zenchuk, *Quant. Inf. Comp.* **16**, 1349 (2015).
15. E. B. Fel'dman and S. Lacelle, *Chem. Phys. Lett.* **253**, 27 (1996).
16. U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 74 (1957).
17. P. Jordan and E. Wigner, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).
18. H. B. Cruz and L. L. Goncalves, *J. Phys. C* **14**, 2785 (1981).