

ОБ ОПТИМАЛЬНОМ ПО ВРЕМЕНИ УПРАВЛЕНИИ МЕТОДОМ ЯМР СОСТОЯНИЯМИ КУТРИТОВ, ПРЕДСТАВЛЕННЫХ КВАДРУПОЛЬНЫМИ ЯДРАМИ СО СПИНОМ $I = 1$

В. Е. Зобов, В. П. Шауро*

*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 10 ноября 2010 г.

Рассматриваются элементарные логические операторы (селективный поворот, преобразование Фурье, контролируемый сдвиг фазы, вентиль SUM) для квантового компьютера на трехуровневых системах (кутритах), представленных ядерными спинами $I = 1$, в условиях ядерного магнитного резонанса. Выполнено компьютерное моделирование реализации данных операторов с помощью простых и составных селективных радиочастотных (РЧ) импульсов, а также оптимизированных РЧ-импульсов, временная зависимость амплитуды которых найдена методом численной оптимизации при разной длительности. Предложены два варианта реализации двухкутритового вентиля SUM с помощью однокутритовых или двухкутритовых оптимизированных РЧ-импульсов. Рассчитанные временные зависимости ошибок реализаций позволили исследовать на оптимальность по времени различные способы получения вентиля, как ранее предложенные, так и предложенные в настоящей работе. Сделаны выводы о достоинствах и недостатках каждого из способов при разных значениях физических параметров.

1. ВВЕДЕНИЕ

Применение многоуровневых квантовых систем в качестве базовых элементов при квантовых вычислениях обещает ряд преимуществ. Во-первых, в том случае, когда квантовый алгоритм выполняют, прикладывая к системе рабочих кубитов последовательно во времени одно- или двухкубитовые элементарные логические операторы (вентили), можно уменьшить число вентиля, вставив вместо двухуровневой частицы многоуровневую частицу, например трехуровневую [1, 2]. Во-вторых, при другом возможном способе выполнения алгоритма [3–7], при котором добавляют регистр из кубитов (счетчик или курсор), нумерующий операции, а гамильтониан системы берут в виде суммы произведений гамильтонианов отдельных вентиля на оператор, изменяющий состояние счетчика, нужно, как минимум, трехчастичное взаимодействие большого радиуса между кубитами разных регистров. Вернуться к обычному парному взаимодействию ближайших соседей удастся, если перейти к многоуровневым частицам и реализовать рабочие кубиты и кубиты счетчи-

ка виртуально на разных уровнях одной такой частицы [3–7]. В-третьих, для квантового вычисления посредством последовательности измерений приготовление устойчивого начального состояния проще на многоуровневых системах, чем на двухуровневых [8]. Наконец, при организации вычислений на кудитах (квантовых системах с d уровнями) требуется меньшее число элементов для получения нужного размера вычислительного базиса [9–12]. Следующим за кубитом по числу уровней идет кутрит — элемент с тремя состояниями. При реализации квантовых алгоритмов на кутритах можно перейти от двоичной системы счисления к троичной и использовать ее достоинства [12–14].

Любой квантовый алгоритм, как известно [15–17], может быть выполнен с помощью последовательности одно- и двухкутритовых вентиля [9, 10, 16, 18, 19]. Поэтому необходимо уметь реализовывать такие вентили на различных физических системах. К настоящему времени эта задача еще далека от своего полного решения. В предлагаемой работе мы выбрали в качестве кутритов квадрупольные ядра со спином $I = 1$, управляемые в условиях ЯМР радиочастотным (РЧ) магнитным

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

полем [20]. В сильном постоянном магнитном поле и в неоднородном электрическом поле ядро имеет три неэквидистантных энергетических уровня, разделенных интервалами $\hbar(\omega_0 \pm q)$, где ω_0 — ларморовская частота, q — константа квадрупольного взаимодействия. Спектр ЯМР является дублетом с расщеплением $2q$ вследствие действия правила отбора, допускающего только переходы с изменением проекции спина на единицу. В качестве примера укажем ядро дейтерия, на котором в работе [21] были реализованы однокутритные вентили. Для осуществления двухкутритных вентиляей мы предполагаем наличие слабого спин-спинового взаимодействия. Целью выполненного нами исследования (численного моделирования) было выявление основных закономерностей управления многоуровневыми системами и, прежде всего, сравнение времени эксперимента при различных способах реализации вентиляей, так как для успешного проведения опыта на реальной установке необходимо успеть провести всю последовательность вентиляей за время, меньшее времени релаксации (декогерентизации) системы.

Наиболее прямым способом управления состоянием квадрупольного ядра является применение селективных РЧ-импульсов с частотой, равной частоте нужного перехода, и малой амплитудой $\omega_{rf} \ll q$. В качестве примеров квантовых вычислений на одном квадрупольном ядре с помощью селективных импульсов гауссовой формы укажем работы [21–26]. Наряду с этим для преобразования состояния квадрупольного ядра применяют РЧ-импульс с амплитудой, модулированной по гармоническому закону [25–28]. Частоты гармоник задаются равными частотам переходов, а их амплитуды — в соответствии с требуемым преобразованием, например, преобразованием равновесного состояния в эффективно чистое. В настоящее время для обеспечения достаточно большого времени декогерентизации квантовые ЯМР-вычисления реализуются в жидкокристаллической фазе, в которой тепловые движения усредняют неоднородности магнитных полей и межмолекулярные взаимодействия, приводя к спектрам ЯМР из очень узких линий. Эти же движения сильно ослабляют квадрупольные и внутримолекулярные диполь-дипольные взаимодействия, вследствие чего, с одной стороны, длительность селективных импульсов возрастает. С другой стороны, открывается дополнительная возможность управления посредством мощных неселективных РЧ-импульсов [21, 24].

Недавно мы предложили последовательности из

неселективных РЧ-импульсов, разделенных интервалами свободной эволюции с квадрупольным взаимодействием, для осуществления составных селективных поворотов между двумя соседними уровнями квадрупольного ядра [29, 30]. Найдена минимальная длительность T_∞ такого составного оператора, равная суммарной длительности интервалов свободной эволюции. Теоретически показано, что для длительностей составных операторов T , больших чем T_∞ , ошибку поворота можно сделать сколь угодно малой, тогда как при $T < T_\infty$ ошибка остается конечной.

В последнее время для управления состоянием квадрупольных ядер стали применять методы оптимизации, при которых временные зависимости амплитуды и фазы РЧ-импульса находятся численно из условия обеспечения минимальной ошибки реализации заданного унитарного преобразования. Так, например, в работе [31] решается задача оптимизации возбуждения трехквантовых переходов квадрупольного ядра ^{87}Rb ($I = 3/2$) в условиях вращения под магическим углом. Авторы применили для расчета метод оптимизации GRAPE (gradient ascent pulse engineering) [32]. Далее, в работах [33, 34] этот метод был применен для возбуждения центрального перехода квадрупольных ядер ^{23}Na ($I = 3/2$). Для решения этой же задачи в работе [34] предложен модифицированный метод оптимизации Кротова, обеспечивающий лучшую сходимость итераций. Наконец, в работах [35, 36] для преобразования квантового состояния спина ядра ^{23}Na (в монокристалле [35] и в жидком кристалле [36]) применен так называемый сильно модулированный импульс, состоящий из нескольких РЧ-импульсов с характеристиками, подобранными методом численной оптимизации, предложенной в работе [37].

В данной работе мы применяем метод оптимизации GRAPE для выполнения квантовых вычислений на квадрупольных ядрах со спином $I = 1$. Рассчитываются оптимизированные РЧ-импульсы для однокутритовых вентиляей селективных поворотов, квантового преобразования Фурье (КПФ), а также двухкутритового вентиля SUM [10, 16, 18, 19, 38]. Расчет выполняется при разных длительностях импульсов. По примеру работы [32] временные зависимости ошибки позволили исследовать на оптимальность по времени ранее предложенные способы реализации вентиляей, такие как составной селективный поворот [29, 30], КПФ и вентиль SUM, полученные с помощью РЧ-импульсов, селективных по квадрупольному либо спин-спиновому расщеплению линии ЯМР [38]. Расчет с помощью алгорит-

ма GRAPE формы управляющего РЧ-поля для реализации вентиля SUM выполняется нами по двум схемам: во-первых, сразу для полного унитарного оператора с матрицей 9×9 , во-вторых, посредством оптимизированных РЧ-импульсов для однокутритовых вентилях с матрицами 3×3 . Второй вариант важен в перспективе его распространения на многокутритовые системы, поскольку, как указывалось в работе [39] на примере многокубитовых систем, оптимизация по полному базису является экспоненциально сложной задачей. Нами изучаются зависимости ошибки вентилях от физических параметров и даются рекомендации для их реализации.

2. ОДНОКУТРИТОВЫЕ ВЕНТИЛИ

2.1. Теория управления

Рассмотрим квадрупольное ядро со спином $I = 1$, помещенное в постоянное сильное магнитное поле B_0 и управляющее магнитное РЧ-поле B_{rf} . В системе координат (ВСК), вращающейся вокруг направления постоянного поля (ось z) с частотой ω_{rf} РЧ-поля [20], гамильтониан нашей модели принимает вид

$$H(t) = -(\omega_0 - \omega_{rf})I_z + q(I_z^2 - 2/3) + u_x(t)I_x + u_y(t)I_y. \quad (1)$$

Здесь $\omega_0 = \gamma B_0$ — ларморова частота, I_α — оператор проекции спина на ось α , q — константа квадрупольного взаимодействия ядра с градиентом аксиально-симметричного кристаллического поля, $u_\alpha(t)$ — частота, равная умноженной на гиромангнитное отношение γ проекции управляющего РЧ-поля B_{rf} на ось α ($\alpha = x, y$), которую мы в дальнейшем для краткости будем называть амплитудой РЧ-поля. Энергию также будем измерять в частотных единицах, положив $\hbar = 1$. При выключенном РЧ-поле система имеет три неэквидистантных уровня энергии,

$$\lambda_0 = -\omega_0 + q/3, \quad \lambda_1 = -2q/3, \quad \lambda_2 = \omega_0 + q/3,$$

для состояний с различными значениями I_z ,

$$\begin{aligned} |I_z = 1\rangle &= |0\rangle, & |I_z = 0\rangle &= |1\rangle, \\ |I_z = -1\rangle &= |2\rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

Их мы выберем в качестве вычислительного базиса кутрита.

Для реализации квантовых вычислений необходимо найти управляющее РЧ-поле такое, чтобы оператор эволюции

$$U(T) = \hat{D} \exp \left(-i \int_0^T H(t) dt \right) \quad (3)$$

за время T выполнял некоторое логическое унитарное преобразование состояния кутрита, заданное матрицей 3×3 в вычислительном базисе (2). Здесь \hat{D} — оператор упорядочения во времени.

Например, однокутритовый вентиль селективного поворота на угол θ на переходе между состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$ представляется матрицей

$$R_\alpha^{0-1}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -ie^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} & 0 \\ -ie^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Параметр φ определяет направление оси поворота в плоскости xy в ВСК. Так, при $\varphi = 0$ поворот осуществляется вокруг оси x ($\alpha = x$), при $\varphi = \pi/2$ — вокруг оси y ($\alpha = y$).

Селективный поворот (4) вокруг оси y можно осуществить с помощью РЧ-импульса прямоугольной формы, $u_x(t) = 0$, $u_y(t) = \Omega$, с частотой $\omega_{rf} = \omega_0 - q$ и длительностью

$$T_p = \frac{\theta}{\Omega\sqrt{2}}. \quad (5)$$

Для получения селективного поворота с высокой точностью необходимо, чтобы $\Omega \ll q$, поскольку при больших амплитудах поля будет возбуждаться не только резонансный переход. Уменьшить ошибку такого поворота можно, выбрав более сложную форму импульса, например гауссову. В настоящее время для нахождения оптимальной формы РЧ-импульсов широко применяют различные численные методы.

При поиске управляющего РЧ-поля с помощью оптимизационного алгоритма GRAPE [32] амплитуду $u_\alpha(t)$ итеративно изменяют, максимизируя производящую функцию

$$\Phi = |\text{Sp} \{U_0^* U(T)\}|^2 / \{\text{Sp}(1)\}^2$$

и, соответственно, минимизируя ошибку получаемого вентиля,

$$\Delta = 1 - \Phi. \quad (6)$$

Здесь $U(T)$ — матрица оператора эволюции (3) в течение времени T , U_0 — матрица идеального преобразования, которое требуется получить. Временной

интервал T разбивается на N равных отрезков длительностью $\Delta t = T/N$ и на каждом j -м отрезке амплитуда поля остается постоянной и равной $u_\alpha(t_j)$, где $t_j = j\Delta t$ и $j = 1, 2, \dots, N$. Вычисление градиента $\delta\Phi/\delta u_\alpha(t_j)$, согласно формулам из [32], дает новые значения $u_\alpha(t_j)$, $\alpha = x, y$ для следующей итерации алгоритма:

$$u_\alpha(t_j) \rightarrow u_\alpha(t_j) + \varepsilon \frac{\delta\Phi}{\delta u_\alpha(t_j)},$$

где ε — малый параметр. Вычисления останавливаются, когда разность ошибок (6) в двух последних итерациях станет меньше некоторого значения (порядка 10^{-10} в наших расчетах). Отметим также, что мы не накладывали никаких ограничений на амплитуду и форму управляющего поля.

2.2. Селективные повороты

С помощью алгоритма GRAPE был выполнен расчет $u_\alpha(t)$ для селективных поворотов $R_y^{0-1}(\theta)$ на разные углы ($\pi/4, \pi/2, 3\pi/4, \pi$) и при различной длительности импульса T . Управляющее РЧ-поле было настроено на центральную частоту $\omega_{rf} = \omega_0$, а в качестве начального условия выбирался прямоугольный импульс с малой амплитудой. Результаты вычислений приведены на рис. 1–3. На рис. 1 наблюдается резкое увеличение ошибки Δ (см. (6)) при уменьшении длительности импульса ниже некоторого значения T_m , которое зависит от угла поворота θ . Величина T_m близка к теоретическому значению $T_\infty = 3\theta/2\sqrt{2}q$, полученному в работах [29, 30] для составного селективного импульса. Мы здесь не приводим результатов для селективных РЧ-импульсов детерминированной формы (прямоугольной или гауссовой), поскольку на рассматриваемых масштабах времени они приводят к ошибкам, большим на несколько порядков [29, 30, 40, 41].

Напомним, что в работах [29, 30] составной селективный поворот на угол θ за время T осуществляется с помощью эффективного гамильтониана H_{eff} , получаемого из H_q (см. второе слагаемое в формуле (1)) под действием сильных неселективных РЧ-импульсов. В частности, для $R_y^{0-1}(\theta)$ найдено

$$TH_{eff} = \exp\left(\frac{i\pi I_x}{4}\right) (H_q t_1) \exp\left(-\frac{i\pi I_x}{4}\right) + \exp\left(-\frac{i\pi I_y}{2}\right) (H_q t_2) \exp\left(\frac{i\pi I_y}{2}\right) + \eta I_y, \quad (7)$$

где $t_1 = 2t_2 = \theta/q\sqrt{2}$, $\eta = \theta/2\sqrt{2}$. На рис. 1 для сравнения показана ошибка для составных импульсов се-

лективных поворотов, полученных из гамильтониана (7) и смоделированных в приближении сильного РЧ-поля $\Omega \gg q$. Соотношение между амплитудой РЧ-поля и длительностью составного импульса определяется формулой

$$\Omega = \frac{\theta/2\sqrt{2} + 2\pi N_c}{T - T_\infty}, \quad (8)$$

где N_c — число циклов в разложении Троттер–Сузуки, которое используется для повышения точности построения эффективного гамильтониана (7) из некоммутирующих операторов составного импульса. Величина T_∞ определяется длительностью интервалов свободной эволюции в составном импульсе,

$$T_\infty = t_1 + t_2 = \frac{3\theta}{2\sqrt{2}q}. \quad (9)$$

Из наших результатов следует, что при $T > T_\infty$ ошибку селективного поворота можно сделать сколь угодно малой, увеличивая N_c . Однако при этом надо увеличивать полное число неселективных РЧ-импульсов, $N_S = 7N_c$, и их амплитуду Ω . При уменьшении Ω ошибка возрастает из-за нарушения идеальности неселективных поворотов вследствие квадрупольного взаимодействия. Эту ошибку можно уменьшить, заменив простые неселективные РЧ-импульсы на более сложную последовательность импульсов [30], но при такой замене увеличивается общая длительность операции.

В пределе $\Omega \rightarrow \infty$ время выполнения селективного поворота с помощью составного импульса равно $T = T_\infty$. Если уменьшить это время в эффективном гамильтониане (7) до величины $T = xT_\infty = 3x\theta/2\sqrt{2}q$ ($x \in [0, 1]$), то идеальный селективный поворот не будет достигнут. Ошибка для оператора (4) в этом случае будет описываться формулой

$$\Delta = 1 - \frac{1}{9} \left[\frac{a^2}{A^2} + \left(1 + \frac{a^2}{A^2} \right) \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta A}{2} + \frac{b^2}{A^2} \left(\cos \frac{\theta}{2} + \cos \frac{\theta A}{2} \right) + \frac{2a}{A} \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta A}{2} \right]^2, \quad (10)$$

где $a = (1+x)/2$, $b = (1-x)/2$, $A^2 = a^2 + b^2$. Отметим, что ошибка (10) связана с искажением самого эффективного гамильтониана (7), а не с использованием разложения Троттер–Сузуки для некоммутирующих операторов (т. е. соответствует пределу $N_c \rightarrow \infty$, тогда как при конечном значении N_c ошибка будет больше). Из рис. 1 видно, что зависимость (10) хорошо описывает численные результаты, полученные методом GRAPE при углах $\theta = \pi/4$

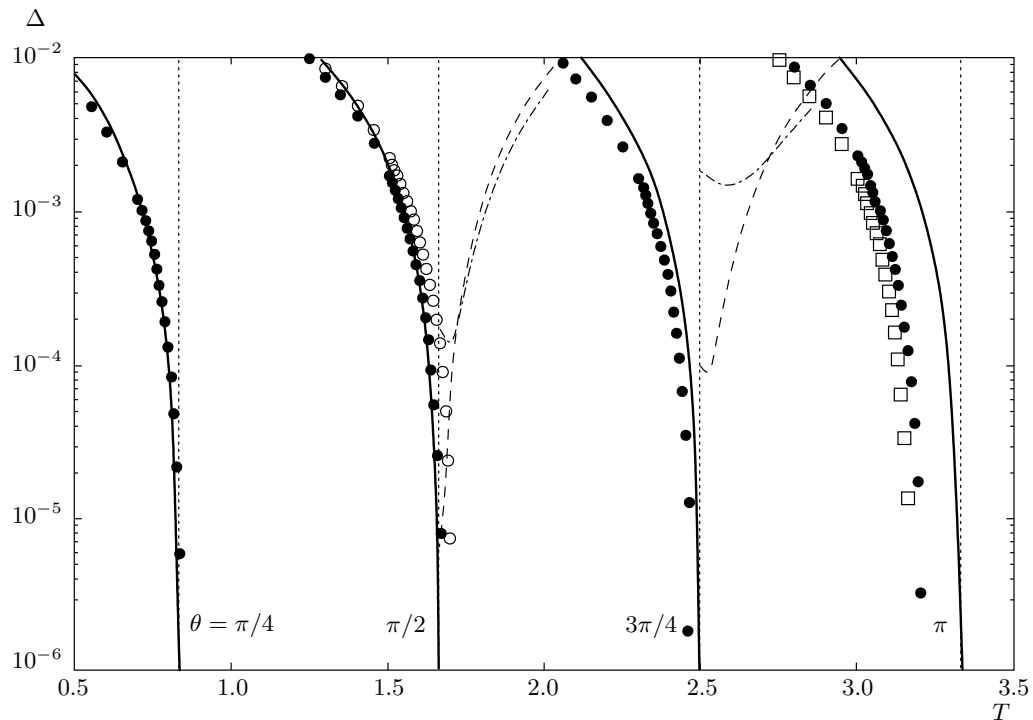


Рис. 1. Зависимости ошибки (6) для оператора $R_y^{0-1}(\theta)$ от длительности оптимизированного импульса T (в единицах $1/q$), рассчитанные при различных значениях θ и при числах разбиений $N = 100$ (\square), 50 (\bullet), 30 (\circ). Вертикальные пунктирные линии соответствуют значениям времени T_∞ (9). Сплошными линиями показана теоретическая оценка ошибки (10) для соответствующих углов поворота. Зависимости ошибки для импульсных последовательностей из работы [30] показаны штрихпунктирными линиями при $N_c = 1$ и штриховыми линиями при $N_c = 2$

и $\theta = \pi/2$. При больших углах поворота оптимизированный импульс с той же ошибкой реализуется за меньшее время (на 7% для угла π). По-видимому, это связано с тем, что в оптимизированном импульсе РЧ-поле действует одновременно с H_q , тогда как в случае идеального составного импульса — последовательно. Поэтому в случае оптимизированного импульса алгоритм GRAPE находит такую форму временной зависимости РЧ-поля, при которой квадрупольное взаимодействие не мешает осуществлению заданной операции, а наоборот способствует. Вследствие такого согласованного учета одновременного действия H_q и H_{rf} достигается большая эффективность.

Форма оптимизированных импульсов при $\theta = \pi/2$ показана на рис. 2. При уменьшении длительности импульсов средняя амплитуда РЧ-поля растет. Форма оптимизированного импульса слабо зависит от начального условия при $T \leq T_m$, тогда как при $T > T_m$ можно получить разные импульсы, приводящие к очень малой ошибке. При увеличении числа N разбиений временного интер-

вала форма импульса изменяется незначительно и ошибка стремится к некоторому предельному значению, как это видно из рис. 3 для π -импульса. При небольших N может происходить заметное изменение формы и средней амплитуды РЧ-поля из-за плохой устойчивости алгоритма при нарушении условия $\Delta t \ll \|H\|^{-1}$ [32].

Амплитуды РЧ-поля оптимизированных импульсов во много раз меньше значений (8) при тех же длительностях. Так, из рис. 1 и 2 следует, что уже при $N = 30$ оптимизированный импульс с модулем амплитуды РЧ-поля, не превосходящим $23q$, осуществляет поворот на угол $\pi/2$ за время $T = 1.69/q$ с той же ошибкой, что и составной из 14 импульсов с амплитудой $550q$.

Мы не рассматриваем операторы других селективных поворотов [29], поскольку результаты для них качественно такие же.

Следует отметить, что в работах [40, 41] метод GRAPE был применен к трехуровневой системе сверхпроводника для решения принципиально другой задачи: устранения ошибки от третьего уров-

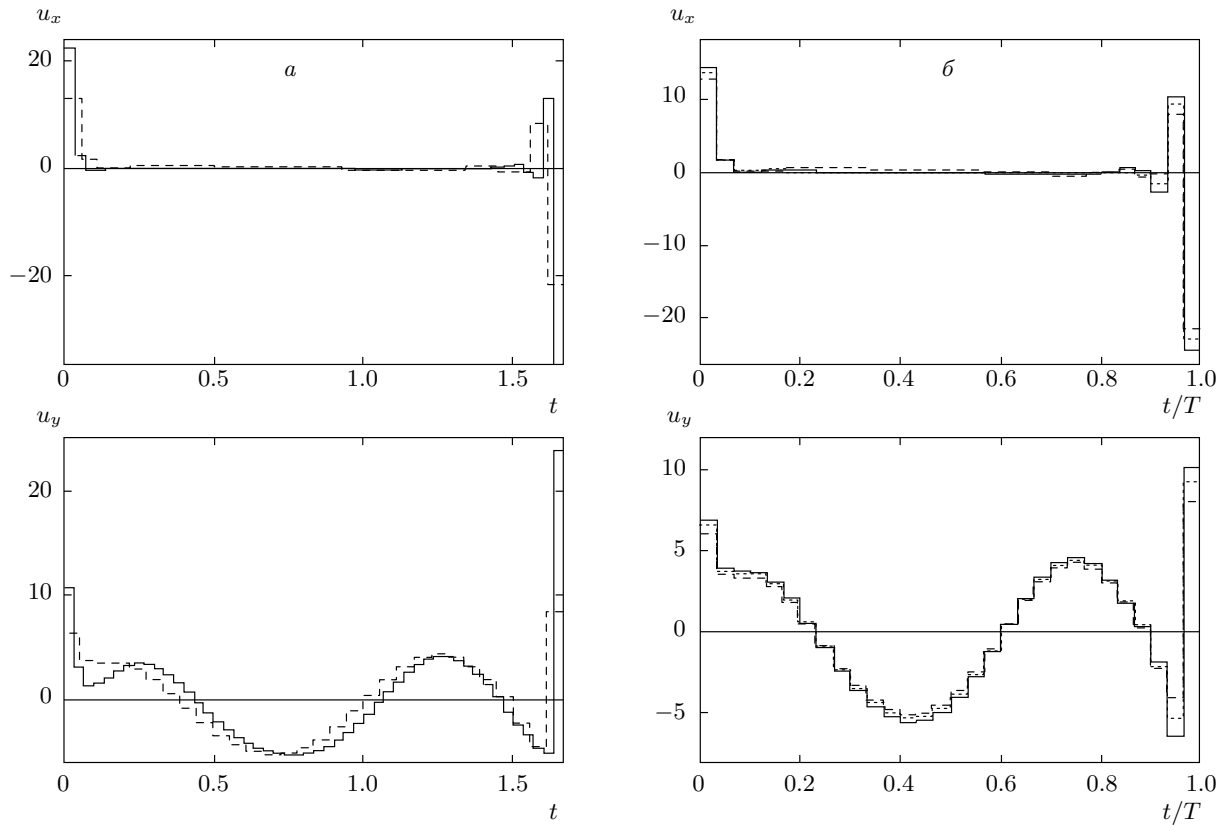


Рис. 2. Изменение формы оптимизированного РЧ-импульса для оператора $R_y^{0-1}(\pi/2)$: *a* — при длительности $T = 1.67$ и $N = 50$ (сплошные линии), 30 (штриховые линии); *б* — при $N = 50$ и $T = 1.5$ (сплошные линии), 1.6 (пунктирные), 1.7 (штриховые). Амплитуды и время измеряются соответственно в единицах q и $1/q$

ня при управлении кубитом на двух уровнях. В работе [41] частота управляющего поля была выбрана равной резонансной частоте отдельного перехода трехуровневой системы (оптимизация селективного импульса), тогда как в нашем случае взято $\omega_{rf} = \omega_0$. Оба варианта допустимы при применении РЧ-поля с большой амплитудой, необходимой для уменьшения длительности импульса. Наша настройка на центральную частоту является более универсальной, поскольку позволяет управлять всеми переходами с помощью РЧ-поля одной частоты, например при осуществлении КПФ на трех уровнях.

2.3. Расчет оптимизированного импульса КПФ

Для осуществления КПФ кутрита селективные повороты следует расположить последовательно во времени согласно схеме [42]

$$\begin{aligned}
 F &= iR_y^{1-2} \left(-\frac{\pi}{2} \right) R_y^{0-1} \left(-2 \operatorname{arctg} \sqrt{2} \right) \times \\
 &\quad \times R_z^{0-1}(\pi) R_y^{1-2} \left(\frac{\pi}{2} \right) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \frac{-1 - i\sqrt{3}}{2} & \frac{-1 + i\sqrt{3}}{2} \\ 1 & \frac{-1 + i\sqrt{3}}{2} & \frac{-1 - i\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Если последовательность селективных поворотов (11) реализовать с помощью оптимизированных импульсов, описанных выше, и взять за приближенную оценку их длительности величину T_∞ , то суммарная длительность КПФ составит $5.36/q$ в случае получения z -поворота за счет сдвига фазы РЧ-поля или $12.02/q$ при использовании составного z -поворота:

$$R_z^{0-1}(\pi) = R_y^{0-1} \left(\frac{\pi}{2} \right) R_x^{0-1}(\pi) R_y^{0-1} \left(-\frac{\pi}{2} \right). \quad (12)$$

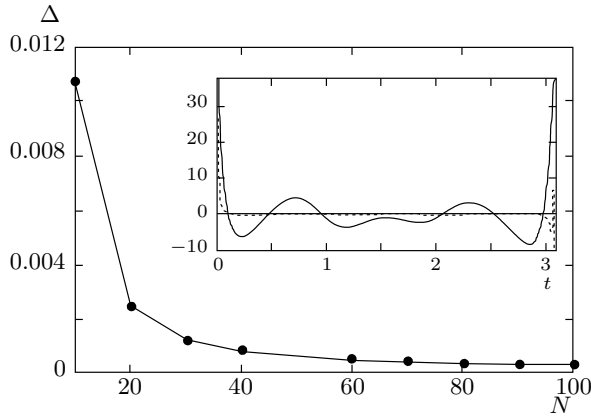


Рис. 3. Зависимость ошибки оператора $R_y^{0-1}(\pi)$ от числа N разбиений при фиксированной длительности РЧ-импульса $T = 3.1$. На вставке показана форма оптимизированного РЧ-импульса при $N = 200$ ($\Delta = 1.9 \cdot 10^{-4}$): u_x — пунктирная линия; u_y — сплошная; максимальные амплитуды на концах временного интервала, $u_x(0) = 42.61$, $u_y(0) = 44.21$, $u_x(3.1) = -61.16$, $u_y(3.1) = 57.66$, не показаны. Амплитуды и время измеряются соответственно в единицах q и $1/q$

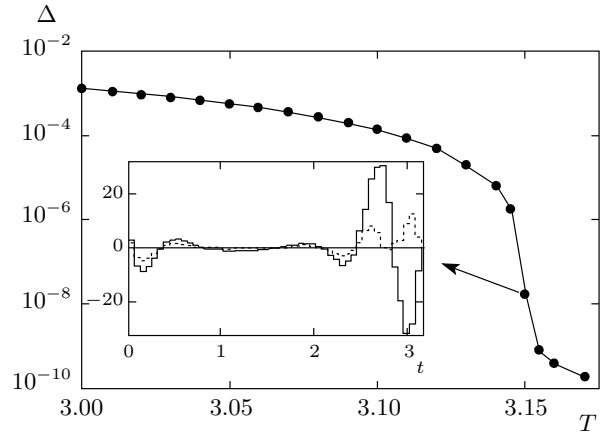


Рис. 4. Зависимость ошибки оператора КПФ от длительности оптимизированного РЧ-импульса, рассчитываемого при $N = 50$. На вставке показана форма оптимизированного РЧ-импульса при $T = 3.15$: u_x — пунктирная линия, u_y — сплошная. Амплитуды и время измеряются соответственно в единицах q и $1/q$

Тот же самый оператор КПФ можно получить, выполнив для матрицы (11) непосредственный расчет $u_\alpha(t)$ с помощью GRAPE. Результаты расчета показаны на рис. 4. Видно, что минимальное время выполнения КПФ в этом случае составляет $T_m \approx 3.15/q$, что меньше приведенных выше значений $5.36/q$ и $12.02/q$ соответственно в 1.7 или 3.8 раза.

3. ДВУХКУТРИТОВЫЙ ВЕНТИЛЬ SUM

Вентиль SUM осуществляет следующую логическую операцию [10, 19]:

$$\text{SUM}_{12}|m\rangle_1 \otimes |n\rangle_2 = |m\rangle_1 \otimes |m+n \pmod{3}\rangle_2, \quad (13)$$

которая состоит в изменении состояния n второго кутрита в зависимости от состояния m первого кутрита. Вычислительный базис в пространстве двух кутритов образуется путем прямого произведения однокутритовых базисов (2). В этом базисе вентиль SUM (13) будет представлять собой матрицу 9×9 , имеющую блочный вид:

$$\text{SUM}_{12} = \begin{bmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & A' \end{bmatrix}, \quad (14)$$

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

A' — транспонированная матрица, а E — единичная матрица.

Рассмотрим реализацию этого вентиля на системе из двух квадрупольных ядер со спином $I = 1$, связанных спин-спиновым взаимодействием (диполь-дипольным в анизотропных средах) с гамильтонианом в ВСК:

$$H = -(\omega_1 - \omega_{rf})I_{1z} - (\omega_2 - \omega_{rf})I_{2z} + q_1 \left(I_{1z}^2 - \frac{2}{3} \right) + q_2 \left(I_{2z}^2 - \frac{2}{3} \right) - JI_{1z}I_{2z} + H_{rf}(t), \quad (15)$$

$$H_{rf}(t) = u_x(t) \left(\frac{\gamma_1 I_{1x}}{\gamma_2} + I_{2x} \right) + u_y(t) \left(\frac{\gamma_1 I_{1y}}{\gamma_2} + I_{2y} \right).$$

Здесь $\omega_k = \gamma_k B_0$ — ларморовская частота спина k , q_k — соответствующие квадрупольные константы, J — константа спин-спинового взаимодействия.

Следует отметить, что в реальных системах, как правило $J \ll q, \omega$. В качестве примера можно привести ядро азота ^{14}N и дейтрон ^2H . Оба ядра имеют спин $I = 1$. Например, в твердом состоянии при поле $B_0 = 70$ кЭ в молекуле азота N_2 $\omega_1 \approx 22$ МГц, $q \approx 4$ МГц, $J \approx 200$ Гц, т.е. отношение J/q порядка 10^{-4} . Для молекулы тяжелой воды D_2O $\omega_1 \approx 46$ МГц, $q \approx 200$ кГц, $J \approx 1$ кГц (взаимодействие между дейтронами) и отношение J/q порядка 10^{-2} . Наконец, в работе [43] в качестве кутрита взято триплетное состояние системы двух водородов группы CH_2 . В этом случае отношение диполь-дипольных констант между группами и внутри группы будет порядка 10^{-1} . Данные соотношения между спин-спиновым и квадрупольным взаимодействиями используются далее в численных расчетах.

При слабом спин-спиновом взаимодействии вентиль SUM может быть реализован с помощью РЧ-поля, вызывающего переходы, селективные по квадрупольному взаимодействию. Схема такой реализации имеет вид [10, 18, 19]

$$\text{SUM}_{12} = (E \otimes F_2)^{-1} P_{12} (E \otimes F_2), \quad (16)$$

где F_2 — оператор фурье-преобразования, действующий на второй спин, P_{12} — двухкутритовый оператор контролируемого сдвига фазы состояний с диагональной матрицей размерности 9×9 , матричные элементы которого определяются следующим образом:

$$\langle mn | P_{12} | mn \rangle = \exp\left(i \frac{2\pi}{3} mn\right). \quad (17)$$

Действие оператора P_{12} состоит в сдвиге фазы на угол, зависящий от состояний m и n кутритов, которые могут принимать значения 0, 1 или 2.

Диагональный оператор P_{12} (17) можно выразить через операторы I_{1z} и I_{2z} [11, 18, 38]:

$$P_{12} = \exp\left(i \frac{2\pi}{3} I_{1z} I_{2z}\right) \exp\left(-i \frac{2\pi}{3} I_{1z}\right) \times \exp\left(-i \frac{2\pi}{3} I_{2z}\right) \exp\left(i \frac{2\pi}{3}\right). \quad (18)$$

Первый оператор реализуется с помощью свободной эволюции квантовой системы с гамильтонианом спин-спинового взаимодействия $H_J = -J I_{1z} I_{2z}$ в течение времени

$$t_J = \frac{2\pi}{3J}. \quad (19)$$

Для устранения нежелательного сдвига фазы вследствие квадрупольного взаимодействия [24] время между прямым и обратным КПФ в (16) должно быть кратным периоду $2\pi/q_2$, поэтому время t_J (19)

будем округлять в меньшую сторону до длительности целого числа таких периодов. Второй и третий операторы в (18) сводятся к действию двух дополнительных z -поворотов на углы $2\pi/3$ на каждом спине [20]:

$$Z_1 = \exp\left(-i \frac{2\pi}{3} I_{1z}\right), \quad Z_2 = \exp\left(-i \frac{2\pi}{3} I_{2z}\right). \quad (20)$$

Эти селективные по спинам, но неселективные по переходам операторы могут быть реализованы несколькими селективными по переходам РЧ-импульсами [38]. Общий фазовый множитель в (18) не оказывает влияния на конечный результат, поэтому он может быть отброшен.

При выбранном соотношении параметров ($J/q \sim 10^{-4} - 10^{-1}$) длительность T вентиль SUM определяется в первую очередь величиной спин-спинового взаимодействия и оказывается равной $T = t_J$, если пренебречь длительностью локальных операторов. При уменьшении времени свободной эволюции

$$T = x t_J = x \frac{2\pi}{3J}$$

нужная разность фаз между состояниями в (18) не будет получена и вентиль (14) будет искажен, а зависимость такой ошибки (6) от параметра x будет описываться формулой

$$\Delta = 1 - \left\{ 1 - \frac{8}{9} \sin^2 \left[\frac{\pi}{3} (1 - x) \right] \right\}^2. \quad (21)$$

При получении этой формулы операторы преобразования Фурье и z -поворотов рассматривались как идеальные, не вносящие ошибок.

Начнем анализ зависимости точности выполнения вентиль SUM (16) от физических параметров с простого случая, когда операторы КПФ (11) реализованы с помощью прямоугольных селективных по квадрупольному расщеплению РЧ-импульсов (5), а z -повороты (20) с помощью сдвига фазы РЧ-поля. Зависимость ошибки (6) от амплитуды РЧ-поля $\Omega_2 = \gamma_2 B_{rf}$ показана на рис. 5. Ошибка возрастает при больших амплитудах поля за счет нарушения селективности импульсов по квадрупольному расщеплению (это объясняется воздействием импульсов при больших амплитудах поля не только на нужные нам переходы, но и в различной степени на все остальные). Наоборот, РЧ-поле малой амплитуды при наличии расстройки $\pm J$ выполняет повороты с искажением, что также приводит к ошибке результата. При совместном действии данных механизмов наблюдается минимум, в котором их влияние

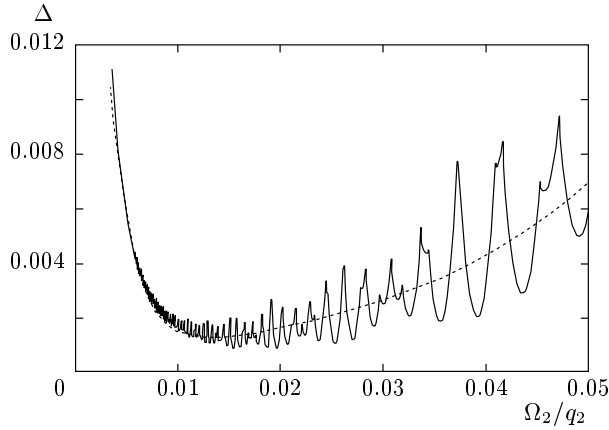


Рис. 5. Зависимость ошибки реализации вентиля SUM с помощью прямоугольных импульсов, селективных по квадрупольному расщеплению спектра, от величины амплитуды РЧ-поля $\Omega_2 = \gamma_2 B_{rf}$. Параметры гамильтониана (15): $\omega_1 = 60q_2$, $\omega_2 = 20q_2$, $q_1 = 2q_2$, $J = 10^{-4}q_2$. Пунктирной линией показана усредненная кривая, полученная путем численной аппроксимации рассчитанной зависимости с помощью суммы трех экспонент

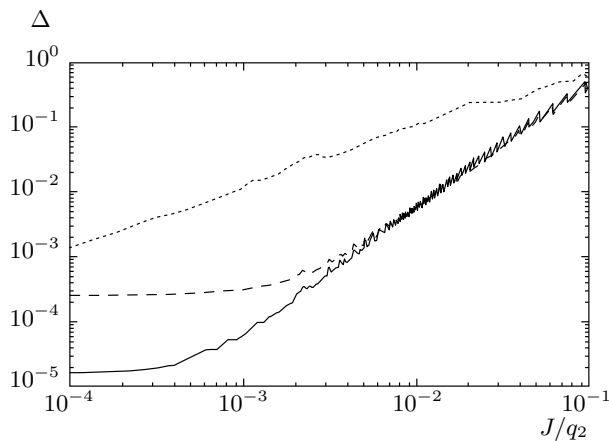


Рис. 6. Ошибка реализации вентиля SUM в зависимости от параметра J : пунктирная линия — зависимость минимальной ошибки, найденной по аппроксимирующей кривой на рис. 5. Ошибка реализации с помощью оптимизированных импульсов по схеме на рис. 7 показана сплошной линией при $\omega_1 = 300q_2$, $\omega_2 = 100q_2$ и штриховой линией при $\omega_1 = 60q_2$, $\omega_2 = 20q_2$. Во всех случаях $q_1 = 2q_2$

на ошибку сравнивается. Зависимость минимальной ошибки от J представлена на рис. 6.

При достаточно сильном спин-спиновом взаимодействии вентиль SUM может быть получен другим

способом — посредством возбуждения РЧ-полем непосредственно тех переходов между состояниями кутритов, которые связаны отличными от нуля матричными элементами в матрице (14), т. е. между следующими состояниями:

$$\left[\begin{array}{l} |1\rangle|0\rangle \rightarrow |1\rangle|1\rangle \quad (\lambda_3 \rightarrow \lambda_4) \\ |1\rangle|1\rangle \rightarrow |1\rangle|2\rangle \quad (\lambda_4 \rightarrow \lambda_5) \\ |1\rangle|2\rangle \rightarrow |1\rangle|0\rangle \quad (\lambda_5 \rightarrow \lambda_3) \end{array} \right], \quad (22)$$

$$\left[\begin{array}{l} |2\rangle|0\rangle \rightarrow |2\rangle|2\rangle \quad (\lambda_6 \rightarrow \lambda_8) \\ |2\rangle|1\rangle \rightarrow |2\rangle|0\rangle \quad (\lambda_7 \rightarrow \lambda_6) \\ |2\rangle|2\rangle \rightarrow |2\rangle|1\rangle \quad (\lambda_8 \rightarrow \lambda_7) \end{array} \right].$$

Переходы между энергетическими уровнями (приведены в круглых скобках) осуществляются с помощью селективных поворотов, аналогичных (4), на угол π на соответствующей резонансной частоте. Импульсная последовательность для получения вентиля будет следующая [38]:

$$R_y^{6-7}\{\pi\} \rightarrow R_y^{7-8}\{\pi\} \rightarrow R_y^{4-5}\{\pi\} \rightarrow R_y^{3-4}\{\pi\}. \quad (23)$$

Стрелки указывают порядок следования импульсов во времени. Эта последовательность обеспечивает селективные повороты не только на разрешенных, но и на запрещенных переходах 6–8 и 3–5 в (22). Резонансные частоты РЧ-импульсов в (15) будут принимать следующие значения:

$$\begin{aligned} \omega^{6-7} &= \omega_2 - q_2 - J, & \omega^{7-8} &= \omega_2 + q_2 - J, \\ \omega^{4-5} &= \omega_2 + q_2, & \omega^{3-4} &= \omega_2 - q_2. \end{aligned} \quad (24)$$

Поскольку близкие частоты в (24) различаются на величину J ($J \ll q$), условием для селективного воздействия на состояния второго кутрита будет малость амплитуды РЧ-поля по сравнению с константой J ($\Omega_2 \ll J$). Следовательно, длительность (5) каждого π -импульса, $T_p = \pi/\Omega\sqrt{2}$, будет много больше t_J (19).

В работе [44] было указано на одну из возможностей сохранить неизменным состояния нерезонансных переходов при таком способе реализации вентиля SUM. Она обусловлена особенностью действия РЧ-поля на ближайшие нерезонансные переходы спиновой системы, отличающиеся от резонансных частот импульсов (22) на величину J из-за спин-спинового взаимодействия. При вращении резонансных переходов второго спина с частотой Ω_2 , эти нерезонансные состояния будут вращаться с частотой $\sqrt{2\Omega_2^2 + J^2/2}$, тем самым вызывая ошибку. Однако если значение амплитуды таково, что при резонансном повороте спина на угол π , нерезонансные

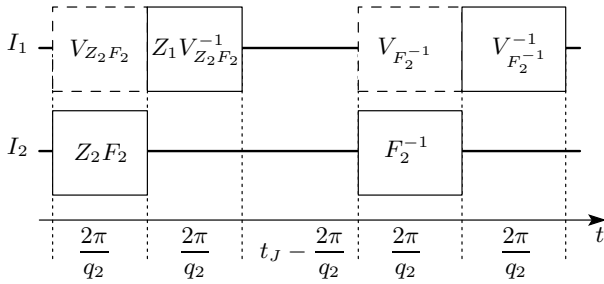


Рис. 7. Схема реализации вентиля SUM с помощью операторов контролируемого фазового сдвига и КПФ с включением исправляющих вентиляей. На временной шкале показаны длительности вентиляей и свободной эволюции, где время t_J округлено в меньшую сторону до длительности целого числа периодов $2\pi/q_2$

состояния прокрутятся на угол кратный 2π , то ошибка вычислений будет минимальной, что и подтвердили наши расчеты [38]. Небольшая ошибка (порядка 10^{-3}) остается от паразитных переходов в первом блоке матрицы SUM (14) с частотами, которые отличаются от резонансных (22) на $2J$. Используя соотношение $\Omega_2 = J/\sqrt{6}$ для первого минимума ошибки, для зависимости времени эксперимента от J получаем

$$T = 4\sqrt{3} \pi / J. \quad (25)$$

Это время больше минимального времени t_J (19) в $6\sqrt{3}$ раз.

На основании результатов предыдущего раздела попробуем уменьшить ошибку, обусловленную нарушением селективности РЧ-импульсов в рассмотренных выше способах реализации SUM, с помощью РЧ-импульсов, оптимизированных методом GRAPE. Будем осуществлять вентиль SUM по схеме, показанной на рис. 7. В этой схеме оператор первого КПФ объединен с оператором фазового сдвига Z_2 и оптимизированные РЧ-импульсы рассчитывались для матриц $Z_2 F_2$ и F_2^{-1} с частотой поля $\omega_{rf} = \omega_2$. Поскольку эти импульсы оказывают нерезонансное воздействие на первый спин, мы представим связанную с этим ошибку как результат действия некоторых соответствующих операторов $V_{Z_2 F_2}$ и $V_{F_2}^{-1}$ на состояние первого кутрита. Для устранения ошибки, вызванной $V_{Z_2 F_2}$ и $V_{F_2}^{-1}$, мы прикладываем оптимизированные импульсы на частоте первого спина ($\omega_{rf} = \omega_1$), осуществляющие операции $Z_1 V_{Z_2 F_2}^{-1}$ и $V_{F_2}^{-1}$. Эти импульсы также будут оказывать влияние на второй спин, но поскольку параметры системы выбраны так, что $\gamma_1 > \gamma_2$, это воздействие будет незначительным, и мы не будем

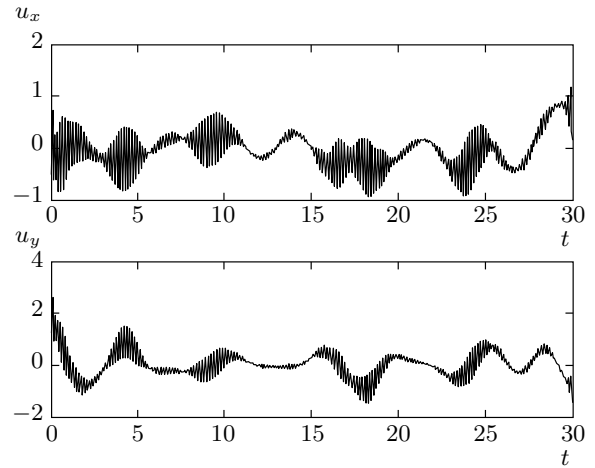


Рис. 8. Форма оптимизированного РЧ-импульса для реализации вентиля SUM, рассчитанная для полной матрицы оператора в базисе 9×9 . Параметры гамильтониана (15): $\omega_1 = 60q_2$, $\omega_2 = 20q_2$, $q_1 = 2q_2$, $J = 10^{-1}q_2$, $\omega_{rf} = \omega_2$. Ошибка операции $\Delta \sim 10^{-6}$. Амплитуды и время измеряются соответственно в единицах q_2 и $1/q_2$

включать дополнительные исправляющие импульсы на втором спине. Все оптимизированные импульсы для перечисленных операторов рассчитывались для отдельных спинов (базис 3×3), и затем моделировалось их действие на полную систему (15) в базисе 9×9 . Для устранения сдвига фазы, вызванного квадрупольным взаимодействием, длительность каждого импульса выбиралась равной $2\pi/q_2$.

Зависимости ошибки вентиля SUM, реализованного по схеме, приведенной на рис. 7, от величины спин-спинового взаимодействия между кутритами при двух значениях $|\omega_1 - \omega_2|$ показаны на рис. 6. При малых J переход от прямоугольных к оптимизированным РЧ-импульсам позволил существенно уменьшить ошибку. При увеличении J , начиная с $J/q \geq 10^{-3}$, наблюдается монотонный рост ошибки $\Delta \sim J^2$. Растущий вклад в ошибку, независимый от $|\omega_1 - \omega_2|$, обусловлен нарушением на $\pm J$ резонансных условий для РЧ-импульсов, селективных по квадрупольному расщеплению, т. е. имеет ту же природу, что и ошибка на рис. 5 при малых амплитудах прямоугольных РЧ-импульсов. Оптимизация, проведенная при выключенном спин-спиновом взаимодействии, не убирает эту часть ошибки. Заметим, что ее можно уменьшить при очень большой величине $|\omega_1 - \omega_2|$, прикладывая к первому спину короткие π -импульсы в середине операторов, действующих на второй спин.

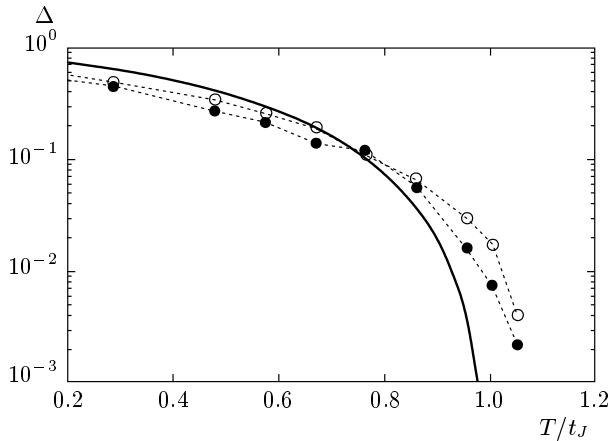


Рис. 9. Зависимость ошибки реализации вентиля SUM от длительности оптимизированного импульса, рассчитанного для полной матрицы 9×9 . Результаты расчета с параметрами $\omega_1 = 60q_2$, $\omega_2 = 20q_2$, $J = 10^{-1}q_2$ (○) и $\omega_1 = 6q_2$, $\omega_2 = 2q_2$, $J = 10^{-2}q_2$ (●). В обоих случаях $q_1 = 2q_2$. Сплошная линия — теоретическая оценка по формуле (21)

Для устранения ошибки, обусловленной спин-спиновым взаимодействием, а заодно и ошибки неселективности РЧ-импульсов при недостаточно большой величине $|\omega_1 - \omega_2|$ следует рассчитывать оптимизированный импульс сразу в базисе 9×9 либо для отдельных операторов (схема на рис. 7), либо непосредственно для матрицы вентиля SUM (14). Последнее предпочтительнее, когда все параметры близки по величине. Пример подобного расчета показан на рис. 8. Управляющее РЧ-поле такой сложной формы при моделировании позволило уменьшить ошибку до $\Delta \sim 10^{-6}$. Осцилляции компонент амплитуд РЧ-поля, $u_x(t)$ и $u_y(t)$, на большой частоте порядка $|\omega_1 - \omega_2|$ при частоте импульса $\omega_{rf} = \omega_2$ показывают, что алгоритм GRAPE подбирает многочастотное РЧ-поле, воздействующее на оба спина одновременно вблизи резонанса. Мы повторили расчет при разных длительностях вентиля (в этом случае условие кратности $2\pi/q_2$ не накладывалось) и двух значениях J . Результаты для ошибки показаны на рис. 9. Там же приведена предельная зависимость, рассчитанная по формуле (21). Из рис. 9 видно, что численные результаты для минимального времени, полученные с помощью GRAPE, дают значение, близкое к граничному $T = t_J$ (19). При $T \lesssim 0.7t_J$ оптимизированный вентиль обладает меньшей ошибкой, тогда как для $T \gtrsim 0.7t_J$ ошибка оказалась больше теоретической оценки (21), хотя качественно и близка к

ней. Расхождения могут быть следствием выбора реальных значений параметров квантовой системы вместо предельных, использованных при выводе формулы (21), но могут быть обусловлены и недостаточной точностью расчета вследствие плохой сходимости алгоритма при $T \sim t_J$. Дело в том, что для воспроизведения многочастотных осцилляций (см. рис. 8) временной интервал разбит на большое число отрезков. Поэтому при медленной сходимости происходит возрастание времени вычислений до нескольких суток и приходится останавливать расчет после большого числа итераций алгоритма (около $5 \cdot 10^4$), а не после достижения желаемой точности.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, изучены зависимости ошибок от длительностей одно- и двухкутритных вентилях при их реализации на квадрупольных ядрах со спином $I = 1$ с помощью простых и составных селективных РЧ-импульсов, а также РЧ-импульсов, оптимизированных методом GRAPE. Основной целью выполненного нами численного моделирования была выработка рекомендаций по сокращению времени вентилях.

Наши расчеты показали, что при той же ошибке длительность селективных поворотов, полученных простым РЧ-импульсом, существенно больше, чем длительность составных и оптимизированных РЧ-импульсов. Длительность составного селективного импульса может быть сделана близкой к оптимальной при использовании последовательности из большого числа мощных неселективных РЧ-импульсов. С помощью оптимизированного РЧ-импульса та же точность может быть достигнута при меньшей амплитуде РЧ-поля уже при небольшом числе разбиений. Однако минимальное время операции сохраняется и в этом случае, поскольку оно определяется взаимодействием H_q , которое обеспечивает неэквидистантность уровней, необходимую для селективности действия H_{rf} и реализации, в конечном счете, универсального унитарного оператора. Этот вывод согласуется с общей теорией управления квантовыми системами [45].

Обратим внимание, что некоторые частные операции с помощью сильного РЧ-поля можно выполнять за произвольно короткое время, например поворот спина полем, произвольно изменяющимся во времени. К разряду таких частных операций относятся импульсы, инвертирующие состояния двух уровней из трех и рассчитанные методом оптимизации

GRAPE в работе [41], поскольку при этом не учитывается фаза состояния третьего уровня, тогда как при создании вентиля для селективного управления состояниями двух уровней кутрита, фаза состояния третьего уровня должна быть равна нулю. В противном случае не удастся, например, осуществить КПФ кутрита по схеме (11).

Проведенное нами исследование показало, что оптимизированный РЧ-импульс, рассчитанный непосредственно для матрицы оператора КПФ, оказывается существенно короче, чем тот же оператор, составленный из операторов селективных поворотов, реализованных оптимизированными РЧ-импульсами. Следовательно, представление оператора КПФ через произведение селективных поворотов не является оптимальным по времени. Отметим, что ранее в работе [46] подобный вывод был сделан для многокубитовых систем из спинов $I = 1/2$, управляемых селективными по спинам РЧ-полями.

Далее, численное моделирование различных способов реализации вентиля SUM позволяет сделать следующие выводы. Способ, использующий слабые селективные по спин-спиновому взаимодействию РЧ-импульсы, является более простым, но, поскольку необходимы малые амплитуды РЧ-поля, увеличивается общее время эксперимента, т. е. этот способ не является оптимальным по времени. В другом способе, основанном на сильных селективных по квадрупольному взаимодействию РЧ-импульсах, последовательность импульсов гораздо сложнее и добавляется время свободной эволюции системы, но изменение условий селективности позволяет увеличить амплитуду РЧ-поля в десятки раз. Длительность эксперимента, таким образом, сокращается в несколько раз.

Расчет вентиля SUM методом численной оптимизации показал, что этот способ является оптимальным по времени в системах со слабым спин-спиновым взаимодействием ($J/q \ll 1$), когда минимальное время определяется величиной J и близко к t_J (19). При этом оптимизированный РЧ-импульс той же длительности позволяет уменьшить ошибку на порядок. Установлено, что при близких значениях параметров ($J/q \sim 10^{-2}-10^{-1}$) предпочтительнее рассчитывать оптимизированный РЧ-импульс для матрицы 9×9 оператора SUM в целом, тогда как при очень слабом спин-спиновом взаимодействии ($J/q \sim 10^{-4}-10^{-3}$) достаточная точность может быть достигнута при расчетах оптимизированных РЧ-импульсов для однокутритовых операторов с матрицами 3×3 , что помимо

сокращения времени вычислений дает большую универсальность. Последний результат имеет большое значение при переходе в дальнейшем к квантовым вычислениям на многокубитовых системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-07-00138) и фонда «Династия».

ЛИТЕРАТУРА

1. T. C. Ralph, K. J. Resch, and A. Gilchrist, *Phys. Rev. A* **75**, 022313 (2007).
2. B. P. Lanyon, M. Barbieri, M. P. Almeida et al., *Nature Phys.* **5**, 134 (2009).
3. D. Aharonov, W. van Dam, J. Kampe et al., *SIAM J. Comput.* **37**(1), 166 (2007), arXiv:quant-ph/0405098.
4. B. A. Chase and A. J. Landahl, arXiv:quant-ph/0802.1207.
5. K. G. H. Vollbrecht and J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 010501 (2008).
6. D. Nagaj and P. Wocjan, *Phys. Rev. A* **78**, 032311 (2008).
7. D. Nagaj, arXiv:quant-ph/1002.0420.
8. J. Cai, A. Miyake, W. Dür, and H. J. Briegel, *Phys. Rev. A* **82**, 052309 (2010).
9. A. Muthukrishnan and C. R. Stroud (Jr.), *Phys. Rev. A* **62**, 052309 (2000).
10. S. D. Bartlett, H. de Guise, and B. C. Sanders, *Phys. Rev. A* **65**, 052316 (2002).
11. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, А. С. Ермилов, Письма в ЖЭТФ **87**, 385 (2008).
12. B. Tamir, *Phys. Rev. A* **77**, 022326 (2008).
13. А. Кушнеров, *Трехичная цифровая техника. Ретро-спектива и современность*, Изд-во университета им. Бен-Гуриона, Израиль (2005).
14. В. Е. Зобов, Д. И. Пехтерев, Письма в ЖЭТФ **89**, 303 (2009).
15. D. Gottesman, *Lect. Not. Comp. Sci.* **1509**, 302 (1999).
16. D. Gottesman, A. Kitaev, and J. Preskill, *Phys. Rev. A* **64**, 012310 (2001).
17. A. Yu. Vlasov, *J. Math. Phys.* **43**, 2959 (2002).
18. J. Daboul, X. Wang, and B. C. Sanders, *J. Phys. A* **36**, 2525 (2003).

19. A. B. Klimov, R. Guzman, J. C. Retamal, and C. Saavedra, *Phys. Rev. A* **67**, 062313 (2003).
20. Ч. Сликтер, *Основы теории магнитного резонанса*, Мир, Москва (1981).
21. R. Das, A. Mitra, V. Kumar, and A. Kumar, *Int. J. Quant. Inf.* **1**, 387 (2003).
22. A. K. Khitrin and B. M. Fung, *J. Chem. Phys.* **112**, 6963 (2000).
23. V. L. Ermakov and B. M. Fung, *Phys. Rev. A* **66**, 042310 (2002).
24. R. Das and A. Kumar, *Phys. Rev. A* **68**, 032304 (2003).
25. R. Das and A. Kumar, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 024107 (2006).
26. T. Gopinath and A. Kumar, *J. Magn. Reson.* **193**, 2 (2008); arXiv:quant-ph/0909.4034.
27. A. K. Khitrin, H. Sun, and B. M. Fung, *Phys. Rev. A* **63**, 020301 (2001).
28. A. K. Khitrin and B. M. Fung, *Phys. Rev. A* **64**, 032306 (2001).
29. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 260 (2007).
30. В. Е. Зобов, В. П. Шауро, *ЖЭТФ* **135**, 10 (2009).
31. T. Vosegaard, C. Kehlet, N. Khaneja et al., *J. Amer. Chem. Soc.* **127**, 13768 (2005).
32. N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet et al., *J. Magn. Reson.* **172**, 296 (2005).
33. J.-S. Lee, R. R. Regatte, and A. Jerschow, *J. Chem. Phys.* **129**, 224510 (2008).
34. I. I. Maximov, J. Salomon, G. Turinici, and N. Chr. Nielsen, *J. Chem. Phys.* **132**, 084107 (2010).
35. H. Kampermann and W. S. Veeman, *J. Chem. Phys.* **122**, 214108 (2005).
36. D. O. Soares-Pinto, L. C. Celeri, R. Auccaise et al., *Phys. Rev. A* **81**, 062118 (2010).
37. E. M. Fortunato, M. A. Pravia, N. Boulant et al., *J. Chem. Phys.* **116**, 7599 (2002).
38. В. П. Шауро, Д. И. Пехтерев, В. Е. Зобов, *Изв. вузов, физика вып.* **6**, 41 (2007).
39. C. A. Ryan, C. Negrevergne, M. Laforest et al., *Phys. Rev. A* **78**, 012328 (2008).
40. P. Rebentrost and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. B* **79**, 060507 (2009).
41. F. Motzoi, J. M. Gambetta, P. Rebentrost, and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 110501 (2009).
42. А. С. Ермилов, В. Е. Зобов, *Опт. и спектр.* **103**, 994 (2007).
43. T. Gopinath and A. Kumar, *Phys. Rev. A* **73**, 022326 (2006).
44. G. P. Berman, G. D. Doolen, G. V. Lopez, and V. I. Tsifrinovich, *Phys. Rev. A* **61**, 042307 (2000).
45. N. Khaneja, R. Brockett, and S. J. Glaser, *Phys. Rev. A* **63**, 032308 (2001).
46. T. Schulte-Herbrüggen, A. Spörl, N. Khaneja, and S. J. Glaser, *Phys. Rev. A* **72**, 042331 (2005).