

МНОГОСПИНОВАЯ ЗАПУТАННОСТЬ В МНОГОКВАНТОВОМ ЯМР С ДИПОЛЬНЫМ УПОРЯДОЧЕННЫМ НАЧАЛЬНЫМ СОСТОЯНИЕМ

И. Д. Лазарев^{a,b}, Э. Б. Фельдман^a*

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

^b *Факультет фундаментальной физико-химической инженерии
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 5 июня 2020 г.,
после переработки 5 июня 2020 г.
Принята к публикации 10 июля 2020 г.

Исследуется многоспиновая запутанность в газе спин-несущих молекул (атомов) в нанопоре в условиях ЯМР с дипольным упорядоченным начальным состоянием. Для оценки количества запутанных спинов используется второй момент распределения интенсивностей многоквантовых когерентностей ЯМР, который определяет нижнюю границу квантовой информации Фишера. Многоспиновая запутанность исследуется при различных температурах для различного количества спинов.

DOI: 10.31857/S0044451020110073

1. ВВЕДЕНИЕ

Запутанность [1] является важной концепцией квантовой механики. В частности, она ответственна за преимущество квантовых компьютеров перед их классическими аналогами. Недавно продемонстрированное квантовое превосходство [2] на программируемом сверхпроводящем процессоре также связано с понятием запутанности, которое отсутствует в классической физике. Среди многочисленных методов исследования запутанности мы сосредоточились на многоквантовом (МК) ЯМР в твердых телах [3], который широко используется для изучения запутанности в бинарных системах [4–7].

Оказалось также, что МК-спектроскопия ЯМР [3] позволяет извлекать информацию о многоспиновой запутанности [8] с помощью квантовой информации Фишера [9, 10], являющейся ключевой концепцией в квантовой теории информации. Квантовая информация Фишера описывает скорость изменения квантовых состояний, определяемых матрицей плотности, при изменении наблюдаемой, кото-

рая ответственна за МК-когерентности в МК-спектроскопии ЯМР [3]. В МК-спектроскопии ЯМР эта наблюдаемая определяется оператором полной проекции углового спинового момента на направление сильного внешнего магнитного поля. С использованием квантовой информации Фишера [11] для анализа МК-спектра ЯМР можно получить важную информацию о многоспиновой запутанности, поскольку существует связь между вторым моментом спектра [12] и квантовой информацией Фишера [8, 13]. Кроме того, второй момент МК-спектра ЯМР определяет нижнюю границу квантовой информации Фишера [8]. Это означает, что МК-спектроскопия ЯМР является эффективным методом решения квантовых информационных задач.

Многоспиновая запутанность была исследована [13] для несферической нанопоры, заполненной газом спин-несущих молекул в сильном внешнем магнитном поле [14, 15]. Термодинамическое равновесное начальное состояние системы определялось односпиновым зеемановским взаимодействием с внешним магнитным полем [16]. Однако многоспиновую запутанность можно исследовать, когда та же самая система первоначально подготовлена в дипольном упорядоченном состоянии [17] с помощью либо метода адиабатического размагничивания во вращаю-

* E-mail: ilia.lazarev@icp.ac.ru

щейся системе координат (ВСК) [17, 18], либо двухимпульсной последовательности Брокаерта–Джинера [17, 19]. МК-динамика ЯМР с таким начальным состоянием моделировалась как для небольших спиновых систем [16, 20], так и для системы, состоящей из 200–600 спин-несущих молекул (атомов), заполняющих нанопору [21]. Однако подходы, разработанные для этих исследований, ограничены случаем высоких температур и не могут применяться для изучения многоспиновой запутанности.

В настоящей работе мы рассматриваем промежуточный температурный случай с низкой зеэмановской и высокой дипольной температурами. Магнитное упорядочение [22] выходит за рамки данной статьи. Заметим, что двухимпульсный эксперимент Брокаерта–Джинера [19] был разработан для высокотемпературного случая. Мы теоретически показываем, что эксперимент [19] также может выполняться и для промежуточного температурного случая, рассматриваемого нами. Было показано [21], что в МК-эксперименте ЯМР с дипольным упорядоченным начальным состоянием МК-когерентности ЯМР возникают быстрее, чем в МК-эксперименте ЯМР с начальным термодинамическим равновесным состоянием в сильном внешнем магнитном поле. Данное обстоятельство является важным для изучения многоспиновой запутанности, поскольку при этом используется второй момент распределения МК-когерентностей ЯМР. Указанное обстоятельство также важно для исследования распространения многоспиновых корреляций [14, 23–25] и локализации [26, 27]. При этом важную роль играют неупорядоченные по времени корреляции (out-of-time ordered correlations), которые связаны с распределением МК-когерентностей ЯМР.

В данной статье исследуется многоспиновая запутанность с использованием МК-спектра ЯМР спин-несущих атомов (молекул) в нанопоре, когда система приготовлена в дипольном упорядоченном состоянии. В разд. 2 описана разработанная теория МК-динамики ЯМР при низкой зеэмановской температуре и высокой дипольной температуре. Аналитическое решение для МК-динамики ЯМР трехспиновой системы, полученное при таких же температурах, описано в разд. 3. Второй момент МК-спектра ЯМР в качестве меры многоспиновой запутанности рассматривается в разд. 4. В разд. 5 исследуется зависимость многоспиновой запутанности от дипольной температуры и числа спинов в системе. Краткое изложение полученных результатов приведено в разд. 6. В Приложении показано, что двухимпульсная последовательность Брокаерта–Джинера

может быть использована в случае, когда зеэмановская температура низкая, а дипольная — высокая.

2. ТЕОРИЯ МК-ДИНАМИКИ ЯМР В НАНОПОРЕ ПРИ НИЗКОЙ ЗЕЭМАНОВСКОЙ И ВЫСОКОЙ ДИПОЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРАХ

МК-динамика ЯМР в нанопоре определяется гамильтонианом [13, 15]

$$H_{MQ} = -\frac{D}{4} \left[(I^+)^2 + (I^-)^2 \right], \quad (1)$$

где

$$I^\pm = \sum_{j=1}^N I_j^\pm, \quad (2)$$

N — число спинов в нанопоре, I_j^\pm — повышающий или понижающий операторы спина j , D — константа диполь-дипольного взаимодействия (ДДВ), усредненная по быстрой молекулярной диффузии спин-несущих атомов (молекул) в нанопоре. Подчеркнем, что константа ДДВ D одинакова для всех пар взаимодействующих спинов в нанопоре [13, 15]. Матрица плотности $\rho(\tau)$ на подготовительном периоде МК-эксперимента ЯМР [3] может быть получена из эволюционного уравнения Лиувилля [17, 22]

$$i \frac{d\rho(\tau)}{d\tau} = [H_{MQ}, \rho(\tau)] \quad (3)$$

с начальной термодинамической равновесной матрицей плотности

$$\rho(0) = \rho_{eq} = \frac{1}{Z} \exp \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B} \alpha_Z I_z + \frac{\hbar}{k_B} \beta_d H_{dz} \right), \quad (4)$$

где

$$Z = \text{Tr} \left\{ \exp \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B} \alpha_Z I_z + \frac{\hbar}{k_B} \beta_d H_{dz} \right) \right\}$$

— статистическая сумма, k_B — постоянная Больцмана, ω_0 — частота Лармора, I_z — оператор проекции полного углового спинового момента на ось z , который направлен вдоль сильного внешнего магнитного поля, H_{dz} — секулярная часть гамильтониана ДДВ в сильном внешнем магнитном поле, а α_Z и β_d — обратные зеэмановская и дипольная температуры. Мы рассмотрим случай, когда зеэмановская температура является низкой ($\hbar\omega_0 \alpha_Z / k_B \gg 1$), а дипольная — высокой ($\hbar D \beta_d / k_B \ll 1$). Мы предполагаем, что $\omega_0 = 2\pi \cdot 500 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$ и $D = 2\pi \cdot 10^4 \text{ c}^{-1}$. В Приложении мы доказываем, что двухимпульсная последовательность Брокаерта–Джинера [17, 19] позволяет получить дипольное упорядоченное состояние даже при низкой зеэмановской температуре.

Другим методом создания дипольного упорядоченного состояния системы является адиабатическое размагничивание [17, 18]. Используя эти методы, мы можем получить систему в состоянии термодинамического равновесия с матрицей плотности

$$\rho_i = \frac{1}{Z_i} \exp\left(\frac{\hbar\beta_d H_{dz}}{k_B}\right) \approx \frac{1}{Z_i} \left(1 + \frac{\hbar\beta_d}{k_B} H_{dz}\right), \quad (5)$$

где статистическая сумма

$$Z_i = \text{Tr} \left\{ \exp\left(\frac{\hbar\beta_d H_{dz}}{k_B}\right) \right\} \approx 2^N. \quad (6)$$

МК-динамика ЯМР в нанопоре будет исследована на основе уравнения (3) с начальным состоянием (5). Также важно отметить, что гамильтониан H_{dz} частично усредняется быстрой молекулярной диффузией в нанопоре, а усредненный гамильтониан можно записать как [21, 28]

$$H_{dz} = \frac{D}{2}(3I_z^2 - I^2), \quad (7)$$

где I^2 — квадрат углового спинового момента.

Пусть функция $G(\tau, \phi)$ описывает усредненный по равновесной матрице плотности сигнал после периодов подготовки, эволюции и смешивания в МК-эксперименте ЯМР [3]. Ее можно записать в виде [13]

$$\begin{aligned} G(\tau, \phi) &= \text{Tr} \{ \exp(iH_{MQ}\tau) \exp(i\phi I_z) \times \\ &\times \exp(-iH_{MQ}\tau) \rho_i \exp(iH_{MQ}\tau) \times \\ &\times \exp(-i\phi I_z) \exp(-iH_{MQ}\tau) \rho_i \} = \\ &= \text{Tr} \{ \exp(i\phi I_z) \rho(\tau) \exp(-i\phi I_z) \rho(\tau) \}, \quad (8) \end{aligned}$$

где

$$\rho(\tau) = \exp(-iH_{MQ}\tau) \rho_i \exp(iH_{MQ}\tau) \quad (9)$$

является решением уравнения (3) при начальном условии (5). Матрица плотности $\rho(\tau)$ раскладывается в ряд:

$$\rho(\tau) = \sum_n \rho_n(\tau), \quad (10)$$

где $\rho_n(\tau)$ — вклад в $\rho(\tau)$ от МК-когерентности n -го порядка [29]. Тогда функцию $G(\tau, \phi)$ в уравнении (8) можно переписать как

$$G(\tau, \phi) = \sum_n e^{in\phi} \text{Tr} \{ \rho_n(\tau) \rho_{-n}(\tau) \}, \quad (11)$$

где мы учитываем, что

$$[I_z, \rho_n(\tau)] = n\rho_n(\tau). \quad (12)$$

Для дальнейших расчетов необходимо ввести нормированные интенсивности $J_n(\tau)$ ($n = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$) МК-когерентностей ЯМР:

$$J_n(\tau) = \frac{\text{Tr} \{ \rho_n(\tau) \rho_{-n}(\tau) \}}{\text{Tr} \{ \rho_i^2 \}}. \quad (13)$$

Используя уравнения (9), (10), можно проверить, что

$$\begin{aligned} \sum_n J_n(\tau) &= \frac{\text{Tr} \left\{ \sum_n \rho_n(\tau) \rho_{-n}(\tau) \right\}}{\text{Tr} \{ \rho_i^2 \}} = \\ &= \frac{\text{Tr} \left\{ \sum_{m,n} \rho_n(\tau) \rho_m(\tau) \right\}}{\text{Tr} \{ \rho_i^2 \}} = \frac{\text{Tr} \{ \rho^2(\tau) \}}{\text{Tr} \{ \rho_i^2(\tau) \}} = \\ &= \frac{\text{Tr} \{ \exp(-iH_{MQ}\tau) \rho_i^2 \exp(iH_{MQ}\tau) \}}{\text{Tr} \{ \rho_i^2 \}} = 1. \quad (14) \end{aligned}$$

Из уравнения (14) можно сделать вывод, что сумма МК-когерентностей ЯМР сохраняется на подготовительном периоде МК-эксперимента ЯМР [3].

Базис, состоящий из собственных состояний оператора I_z (называемый мультипликативным базисом), широко используется для численных расчетов МК-динамики ЯМР [30]. В связи с быстрым расширением гильбертова пространства с ростом числа спинов такие вычисления возможны только для систем с небольшим числом спинов. Такой подход не подходит для исследований многоспиновой запутанности. Поскольку гамильтониан H_{MQ} уравнения (1) коммутирует с квадратом полного углового момента спинов \hat{I}^2 , можно использовать базис, состоящий из общих собственных состояний I^2 и I_z для изучения МК-динамики ЯМР, как это было сделано в работах [13, 15, 21]. В этом базисе гамильтониан H_{MQ} и исходная матрица плотности (5) (см. также (7)) состоят из блоков, соответствующих различным значениям углового момента спинов [15]. Тогда исследование МК-динамики ЯМР может быть сведено к решению ряда задач меньшей размерности.

Поскольку гамильтониан H_{MQ} уравнения (1) коммутирует с оператором $\exp(i\pi I_z)$, $2^N \times 2^N$ -матрица гамильтониана сводится к двум блокам $2^{N-1} \times 2^{N-1}$ [15]. Для нечетных N оба блока вносят одинаковый вклад в МК-когерентности ЯМР, и можно решить задачу, используя только один блок $2^{N-1} \times 2^{N-1}$, и удвоить полученные интенсивности. В наших расчетах мы берем только нечетные числа спинов. Этим методом можно исследовать МК-динамику ЯМР в системах, состоящих из сотен спинов.

3. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ МК-ДИНАМИКИ ЯМР ТРЕХСПИНОВОЙ СИСТЕМЫ В НАНОПОРЕ В ДИПОЛЬНОМ УПОРЯДОЧЕННОМ СОСТОЯНИИ

Задача получения точного решения МК-динамики ЯМР трехспиновой системы в дипольном упорядоченном состоянии в нанопоре аналогична задаче, рассмотренной в работе [13] для начального термодинамического равновесия в сильном внешнем магнитном поле. При решении задачи мы не будем использовать высокотемпературного приближения [17].

Гамильтониан H_{MQ} уравнения (1) состоит из двух блоков для двух возможных значений углового момента спина ($I^2 = S(S + 1)$, $S = 3/2, 1/2$). Эти блоки и соответствующие им собственные значения и собственные состояния приведены в работе [13]. Матрица плотности системы также состоит из двух блоков, $\rho^{3/2}(\tau)$, $\rho^{1/2}(\tau)$, и

$$\rho^{3/2}(0) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{3b/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-3b/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-3b/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{3b/2} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\rho^{1/2}(0) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где $b = \hbar D/k_B T$ и T — температура. Простыми вычислениями можно получить матрицы плотности $\rho^{3/2}(\tau)$ и $\rho^{1/2}(\tau)$, которые позволяют нам найти интенсивности МК-когерентностей ЯМР.

В рассматриваемых системах появляются только МК-когерентности ЯМР нулевого и плюс/минус второго порядков. Интенсивности этих когерентностей равны

$$J_0(\tau) = 1 - \frac{1}{2} \text{th}^2 \left(\frac{3b}{2} \right) \sin^2 \left(\sqrt{3} D\tau \right), \quad (16)$$

$$J_{\pm 2}(\tau) = \frac{1}{4} \text{th}^2 \left(\frac{3b}{2} \right) \sin^2 \left(\sqrt{3} D\tau \right).$$

Сумма интенсивностей МК-когерентностей, согласно выражениям (16), равна единице в соответствии с уравнением (14). Зависимости рассчитанных интенсивностей $J_n(\tau)$ ($n = 0, \pm 2$) от времени эволюции показаны на рис. 1.

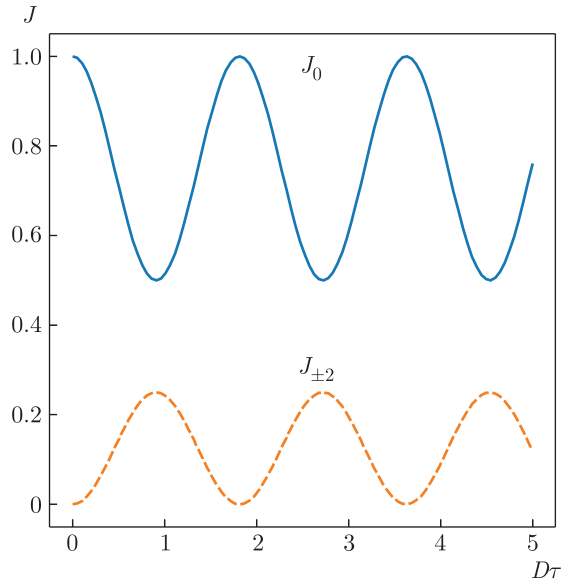


Рис. 1. Интенсивности МК-когерентностей ЯМР J_n ($n = 0, \pm 2$) в нанопоре с $N = 3$ при температуре $T = 9.6 \cdot 10^{-7}$

4. ВТОРОЙ МОМЕНТ МК-СПЕКТРА ЯМР КАК МЕРА МНОГОСПИНОВОЙ ЗАПУТАННОСТИ

Выражение (8) для МК-сигнала ЯМР $G(\tau, \phi)$ может быть разложено в ряд по инкременту фазы импульсов:

$$G(\tau, \phi) = \text{Tr} \{ \rho(\tau) \exp(i\phi I_z) \rho(\tau) \exp(-i\phi I_z) \} =$$

$$= \text{Tr} \{ \rho^2(\tau) \} - \phi^2 \text{Tr} \{ \rho^2(\tau) I_z^2 - (\rho(\tau) I_z)^2 \} + O(\phi^3). \quad (17)$$

Можно доказать [31], что квантовая информация Фишера $F_Q(\rho, I_z)$ [32] удовлетворяет неравенству

$$F_Q(\rho, I_z) \geq 4 \text{Tr} \{ \rho^2 I_z^2 - (\rho I_z)^2 \}. \quad (18)$$

В то же время легко проверить, что выражение $2 \text{Tr} \{ \rho^2(\tau) I_z^2 - (\rho(\tau) I_z)^2 \}$ равно второму моменту M_2 распределения интенсивностей МК-когерентностей ЯМР [12],

$$M_2 = \sum_n n^2 J_n(\tau), \quad (19)$$

где $J_n(\tau)$ ($n = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$) определяется уравнением (13). Таким образом, второй момент распределения МК-интенсивностей ЯМР дает нижнюю границу квантовой информации Фишера $F_Q(\rho, I_z)$. Также показано [9, 10], что если

$$F_Q(\rho, I_z) > nk^2 + (N - nk)^2, \quad (20)$$

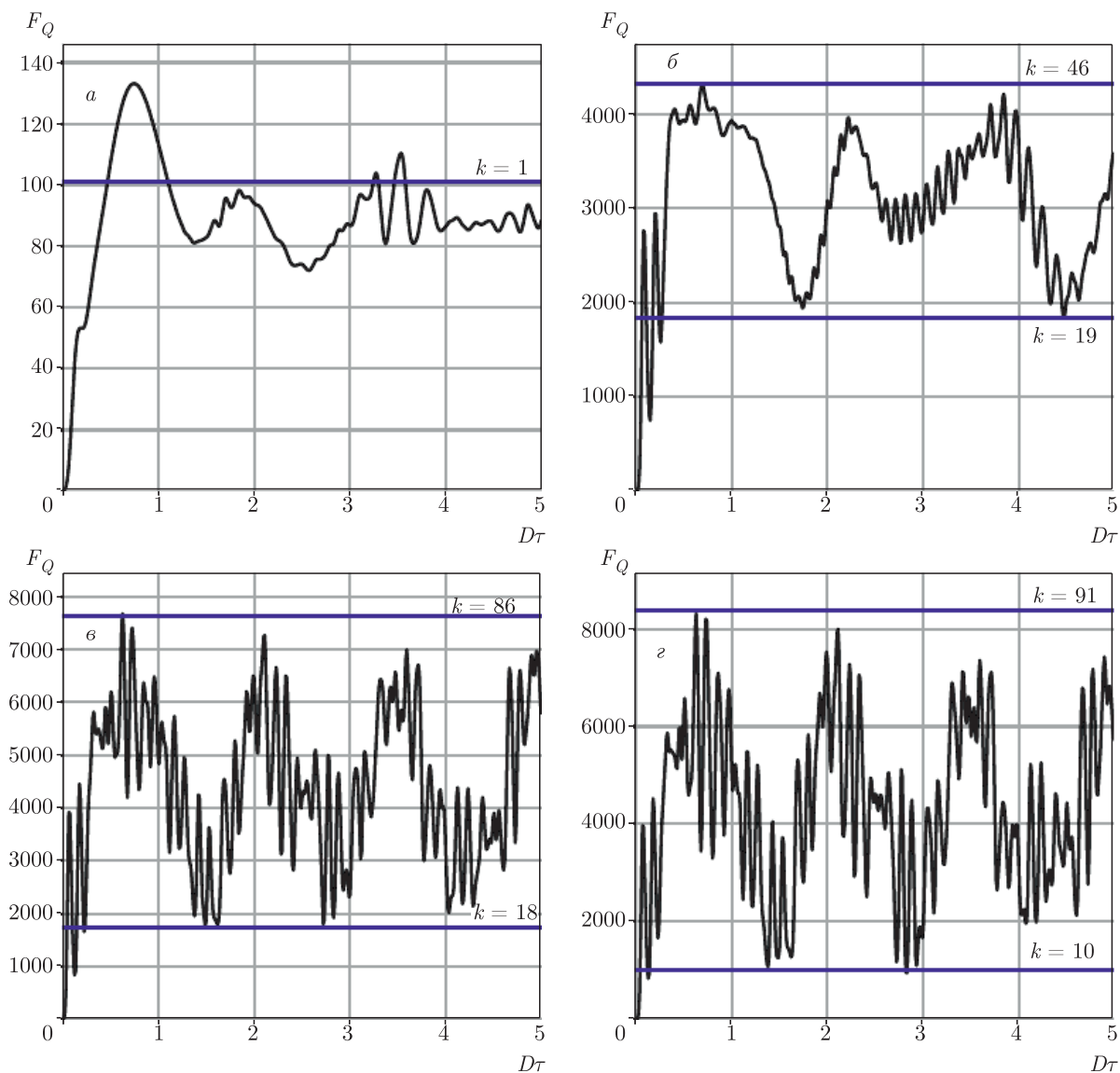


Рис. 2. Зависимости нижней границы квантовой информации Фишера $F_Q = 2M_2$ от безразмерного времени $D\tau$ при $N = 101$: *a* — $T = 6 \cdot 10^{-4}$ К, неравенство (20) определяет область парной запутанности ($k + 1 = 2$), эта область выше горизонтальной линии; *б* — $T = 3.2 \cdot 10^{-4}$ К, область многоспиновой запутанности представляет собой полосу, ограниченную горизонтальными линиями $k = 19$ и $k = 46$; *в* — $T = 1.6 \cdot 10^{-4}$ К, горизонтальные линии $k = 18$ и $k = 86$ ограничивают полосу с многоспиновой запутанностью; *г* — при $T = 4.8 \cdot 10^{-5}$ К возникают запутанные кластеры с 11–92 спинами

где n — целая часть N/k , то система с матрицей плотности $\rho(\tau)$ содержит $k + 1$ запутанных спинов [33–35]. Результаты численного анализа многоспиновой запутанности в системе спин-несущих молекул (атомов), первоначально приготовленных в дипольном упорядоченном состоянии, представлены в следующем разделе.

5. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ МНОГОСПИНОВОЙ ЗАПУТАННОСТИ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ И РАЗЛИЧНОМ ЧИСЛЕ СПИНОВ В СИСТЕМЕ

Рассматриваемая модель спин-несущих молекул (атомов) в нанопоре в дипольном упорядоченном состоянии расширяет возможности исследования мно-

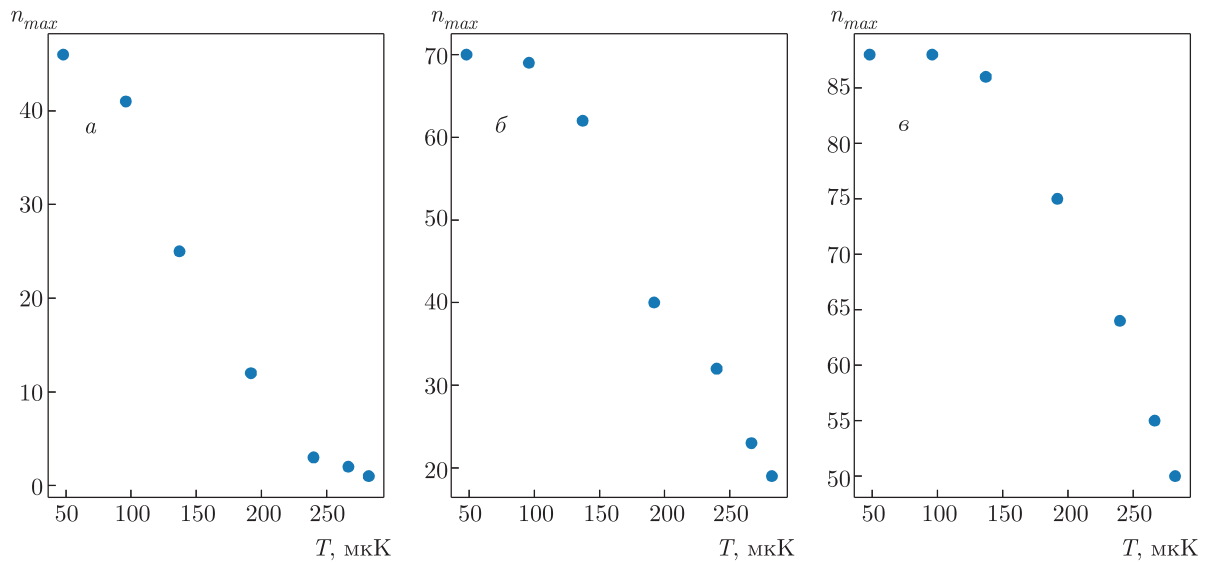


Рис. 3. Зависимости максимального количества запутанных спинов, усредненного по времени эволюции ($0 \leq D\tau \leq 3$), от температуры при $N = 51$ (а); $N = 75$ (б); $N = 101$ (в)

госпиновой запутанности по сравнению с родственной моделью [13], в которой система изначально находилась в термодинамическом равновесии в сильном внешнем магнитном поле. Модель работы [13] неприменима для исследования эволюции системы во времени, потому что распределение МК-когерентностей ЯМР быстро становится стационарным [15]. Многоспиновая запутанность изменяется с температурой в очень узком температурном интервале в модели [13]. Например, все спины запутаны в системе, состоящей из 201 спина уже при температуре $T = 6.856 \cdot 10^{-3}$ К [13].

Зависимости квантовой информации Фишера от времени в системе, состоящей из 101 спина, представлены на рис. 2 при различных температурах. На рис. 2а видно, что при температуре $T = 6 \cdot 10^{-4}$ К существует только парная запутанность. При температуре $T = 3.2 \cdot 10^{-4}$ на рис. 2б появляется полоса, в которой неравенство (20) может быть выполнено, когда $19 \leq k \leq 46$. Таким образом, существует многоспиновая запутанность в спиновых кластерах, состоящих из 20–47 спинов, при температуре $3.2 \cdot 10^{-4}$ К. Когда температура понижается, ширина полосы, в которой существует многоспиновая запутанность, увеличивается. При температуре $T = 1.6 \cdot 10^{-4}$ К (рис. 2в) появляются кластеры из 19–87 запутанных спинов, а при температуре $T = 4.8 \cdot 10^{-5}$ К (рис. 2г), наблюдаются 11–92 запутанных спинов.

Зависимости максимального числа запутанных спинов за время эволюции ($0 \leq D\tau \leq 3$) от температуры при разных числах спинов в нанопоре представлены на рис. 3. Максимальное количество запутанных спинов n_{max} уменьшается при повышении температуры. Максимальное количество запутанных спинов увеличивается, когда увеличивается число спинов в нанопоре, потому что система в нанопоре становится плотнее.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали многоспиновую запутанность в системе спин-несущих молекул (атомов), заполняющих несферические нанопоры в условиях эксперимента МК-спектроскопии ЯМР. Спины изначально находились в дипольном упорядоченном состоянии. Найдены зависимости многоспиновой запутанности от температуры и количества спинов в нанопоре.

Проведенные исследования позволяют заключить, что МК-спектроскопия ЯМР является тонким и полезным методом для исследования различных проблем квантовой информатики. В частности, это очень эффективный метод исследования квантовой запутанности.

Благодарности. Авторы благодарны В. А. Ацаркину за полезное обсуждение.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания (госрегистрация АААА-А19-119071190017-7). Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты №№ 20-03-00147, 19-32-80004). Один из авторов (И. Д. Л.) благодарит Фонд развития теоретической физики «БАЗИС» (грант № 19-1-5-130-1).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Двухимпульсный эксперимент Брокаерта – Джинера при низкой зеemanовской температуре и высокой дипольной температуре

Изначально система находится в состоянии термодинамического равновесия в сильном внешнем магнитном поле с матрицей плотности

$$\sigma_i = \frac{\exp(\beta_L \omega_0 I_z)}{Z_i}, \quad Z_i = \text{Tr} \{ \exp(\beta_L \omega_0 I_z) \}, \quad (21)$$

где величина β_L пропорциональна обратной температуре решетки. После первого резонансного x -импульса получаем

$$\begin{aligned} \sigma'(0) &= \exp\left(i\frac{\pi}{2}I_x\right) \sigma_i \exp\left(-i\frac{\pi}{2}I_x\right) = \\ &= \frac{\exp(\beta_L \omega_0 I_y)}{Z_i}, \end{aligned} \quad (22)$$

где I_α — оператор проекции полного спинового момента на ось $\alpha = x, y, z$. Затем система свободно эволюционирует в течение времени τ , и после этого подается второй резонансный y -импульс, который поворачивает спины на угол θ вокруг оси y ВСК. В результате получаем, что

$$\sigma'(\tau) = \frac{\exp(-i\theta I_y) \exp(-iH_{dz}\tau) \exp(\beta_L \omega_0 I_y) \exp(iH_{dz}\tau) \exp(i\theta I_y)}{Z_i}. \quad (23)$$

По истечении времени T_2 (T_2 — время спиновой релаксации [17]) система достигает состояния термодинамического равновесия,

$$\sigma_f = \frac{\exp(\alpha_Z \omega_0 I_z + \beta_d H_{dz})}{Z_f}, \quad (24)$$

где α_Z и β_d — обратные зеemanовская и дипольная температуры. Очевидно, что система имеет единственное равновесное состояние, а температуры α_Z и β_d в равновесном состоянии находятся из законов сохранения:

$$\text{Tr} \{ I_z \sigma'(\tau) \} = \text{Tr} \{ I_z \sigma_f(\tau) \}, \quad (25)$$

$$\text{Tr} \{ H_{dz} \sigma'(\tau) \} = \text{Tr} \{ H_{dz} \sigma_f(\tau) \}. \quad (26)$$

Можно переписать $\text{Tr} \{ I_z \sigma'(\tau) \}$ как

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ I_z \sigma'(\tau) \} &= \frac{1}{Z_i} \text{Tr} \{ \exp(i\theta I_y) I_z \exp(-i\theta I_y) \times \\ &\times \exp(-iH_{dz}\tau) \exp(\beta_L \omega_0 I_y) \exp(iH_{dz}\tau) \} = \\ &= \frac{1}{Z_i} \text{Tr} \{ (I_z \cos \theta - I_x \sin \theta) \exp(-iH_{dz}\tau) \times \\ &\times \exp(\beta_L \omega_0 I_y) \exp(iH_{dz}\tau) \} = \\ &= \frac{1}{Z_i} \text{Tr} \{ \exp(-i\pi I_y) (I_z \cos \theta - I_x \sin \theta) \times \\ &\times \exp(-iH_{dz}\tau) \exp(\beta_L \omega_0 I_y) \exp(iH_{dz}\tau) \exp(i\pi I_y) \} = \\ &= -\frac{1}{Z_i} \text{Tr} \{ (I_z \cos \theta - I_x \sin \theta) \exp(-iH_{dz}\tau) \times \\ &\times \exp(\beta_L \omega_0 I_y) \exp(iH_{dz}\tau) \} = 0. \end{aligned} \quad (27)$$

В выражении (27) было учтено, что $[\exp(-i\pi I_y), H_{dz}] = 0$. Поскольку мы рассматриваем случай высокой дипольной температуры, можно переписать уравнение (25) как

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{Z_f} \text{Tr} \{ I_z \exp(\alpha_Z \omega_0 I_z) \} + \\ &+ \frac{\beta}{Z_f} \text{Tr} \{ I_z \exp(\alpha_Z \omega_0 I_z) H_{dz} \}. \end{aligned} \quad (28)$$

Заметим, что $\text{Tr} \{ I_z \} = \text{Tr} \{ I_z H_{dz} \} = 0$. В таком случае $\alpha_Z = 0$ удовлетворяет уравнению (25). Таким образом, в рассматриваемом случае получаем дипольное упорядоченное состояние.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univ. Press (2009).
2. F. Arute, R. Babbush, J. C. Bardin et al., *Nature* **574**, 505 (2019).
3. J. Baum, M. Munowitz, A. N. Garroway, and A. Pines, *J. Chem. Phys.* **83**, 2015 (1985).
4. G. B. Furman, V. M. Meerovich, and V. L. Sokolovsky, *Phys. Rev. A* **78**, (2008).
5. G. B. Furman, V. M. Meerovich, and V. L. Sokolovsky, *Quant. Inform. Proc.* **8**, 283 (2009).

6. E. B. Fel'dman and A. N. Purgov, *Письма в ЖЭТФ* **88**, 454 (2008).
7. E. B. Fel'dman, A. N. Purgov, and A. I. Zenchuk, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **370**, 4690 (2012).
8. M. Gärttner, P. Hauke, and A. M. Rey, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 040402 (2018).
9. G. Tóth and I. Apellaniz, *J. Phys. A* **47**, 424006 (2014).
10. L. Pezzé, A. Smerzi, M. K. Oberthaler et al., *Rev. Mod. Phys.* **90**, 035005 (2018).
11. J. Liu, H.-N. Xiong, F. Song, and X. Wang, *Physica A* **410**, 167 (2014).
12. A. Khitrin, *Chem. Phys. Lett.* **274**, 217 (1997).
13. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, and I. D. Lazarev, *Phys. Rev. A* **100**, 022330 (2019).
14. J. Baugh, A. Kleinhammes, D. Han, and Q. Wang, *Science* **294**, 1505 (2001).
15. S. I. Doronin, A. V. Fedorova, E. B. Fel'dman, and A. I. Zenchuk, *J. Chem. Phys.* **131**, 104109 (2009).
16. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, E. I. Kuznetsova et al., *Phys. Rev. B* **76**, 144405 (2007).
17. M. Goldman, *Spin Temperature and Nuclear Magnetic Resonance in Solids*, Clarendon Press, London (1970).
18. C. P. Slichter and W. C. Holton, *Phys. Rev.* **122**, 1701 (1961).
19. J. Jeener and P. Broekaert, *Phys. Rev.* **157**, 232 (1967).
20. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, E. I. Kuznetsova et al., *Письма в ЖЭТФ* **86**, 26 (2007).
21. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, and A. I. Zenchuk, *ЖЭТФ* **140**, 567 (2011).
22. A. Abragam and M. Goldman, *Nuclear Magnetism: Order and Disorder*, Clarendon Press, London (1982).
23. J. Baum and A. Pines, *J. Amer. Chem. Soc.* **108**, 7447 (1986).
24. C. M. Sánchez, R. H. Acosta, P. R. Levstein et al., *Phys. Rev. A* **90**, 042122 (2014).
25. M. Munowitz, A. Pines, and M. Mehring, *J. Chem. Phys.* **86**, 3172 (1987).
26. G. A. Alvarez, D. Suter, and R. Kaiser, *Science* **349**, 846 (2015).
27. K. X. Wei, C. Ramanathan, and P. Cappellaro, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 070501 (2018).
28. E. B. Fel'dman and M. G. Rudavets, *ЖЭТФ* **125**, 233 (2004).
29. E. B. Fel'dman and S. Lacelle, *Chem. Phys. Lett.* **253**, 27 (1996).
30. W. Zhang, P. Cappellaro, N. Antler et al., *Phys. Rev. A* **80**, 052323 (2009).
31. D. Girolami and B. Yadin, *Entropy* **19**, 124 (2017).
32. C. W. Helstrom, *Quantum Detection and Estimation Theory*, Acad. Press, New York (1976).
33. L. Pezzé and A. Smerzi, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 100401 (2009).
34. P. Hyllus, W. Laskowski, R. Krischek et al., *Phys. Rev. A* **85**, 022321 (2012).
35. G. Tóth, *Phys. Rev. A* **85**, 022322 (2012).