

УДК 537.635; 004.942  
PACS 76.60.-k, 02.60.Cb

## Эволюционные уравнения для исследования динамики кубитов в переменных магнитных полях

А. Ю. Ощепков

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия  
aos57@mail.ru

Работа посвящена развитию подхода к исследованию динамики кубитов, позволяющего проследить за поведением системы в процессе квантовых вычислений с помощью компьютерного моделирования. Рассматриваются отдельные и взаимодействующие кубиты на основе спинов  $\frac{1}{2}$  в магнитном поле. Цель работы заключается в получении эволюционных уравнений (уравнений движения) для наблюдаемых, адекватно описывающих состояние системы и дающих возможности для компьютерного моделирования процессов. Динамика кубитов описывается с помощью формализма матрицы плотности чистых состояний. Показан вывод уравнений движения для наблюдаемых, в качестве которых выступают средние значения операторов физических величин, описывающих состояние системы. Для спина  $\frac{1}{2}$  в магнитных полях дан вывод динамического уравнения для вектора спиновой поляризации, являющегося единичным вектором в реальном трёхмерном пространстве. Приведены форма и параметры радиочастотных импульсов, реализующих однокубитовые операции. В случае двух взаимодействующих спинов  $\frac{1}{2}$  дается выражение для матрицы плотности и гамильтониана системы при скалярном косвенном взаимодействии магнитных моментов ядер через электронные оболочки атомов в молекуле. Выводятся эволюционные уравнения для средних дипольных моментов и квадрупольного момента системы. Показано, что в случае слабого взаимодействия динамика системы может быть описана с помощью замкнутой системы уравнений для средних дипольных моментов, совпадающих для этого случая с векторами спиновых поляризаций отдельных спинов. Изложение сопровождается примерами численного решения полученных уравнений, описывающих однокубитовые и двухкубитовые операции. Делается вывод об адекватности созданной математической модели и возможности её применения для компьютерного моделирования процессов квантовых вычислений, влияния на них окружения и стабилизации состояний для предотвращения или уменьшения ошибок при квантовых вычислениях.

**Ключевые слова:** спиновая динамика; ЯМР; квантовая информация; кубит; квантовые логические операции

*Поступила в редакцию 26.02.2024; после рецензии 12.03.2024; принята к опубликованию 12.03.2024*

## Evolutionary equations for studying the dynamics of qubits in variable magnetic fields

A. Yu. Oshchepkov

Perm State University, Perm, Russia  
aos57@mail.ru

The work develops an approach to researching the dynamics of qubits that makes it possible to monitor the behavior of the system in the process of quantum computing using computer simulation. The study deals with individual and interacting qubits based on spin  $\frac{1}{2}$  in a magnetic field. The goal of the work is to obtain evolutionary equations (equations of motion) for observables that adequately describe the state of the system and provide opportunities for computer modeling of processes. The dynamics of qubits are de-

scribed using the formalism of the density matrix of pure states. The paper shows derivation of the equations of motion for observables being the average values of operators of physical quantities that describe the state of the system. For spin  $\frac{1}{2}$  in magnetic fields, the derivation of the dynamic equation for the spin polarization vector, which is a unit vector in real three-dimensional space, is shown. The shape and parameters of radiofrequency pulses that implement single-qubit operations are presented. In the case of two interacting spins  $\frac{1}{2}$ , an expression is given for the density matrix and the Hamiltonian of the system for scalar indirect interaction of the magnetic moments of nuclei through the electron shells of atoms in the molecule. Evolution equations are derived for the average dipole moments and quadrupole moment of the system. It is shown that in the case of weak interaction the dynamics of the system can be described using a closed system of equations for the average dipole moments, which in this case coincide with the spin polarization vectors of individual spins. The presentation is accompanied by examples of numerical solutions of the resulting equations describing one-qubit and two-qubit operations. A conclusion is made about the adequacy of the created mathematical model and the possibility of its use for computer modeling of quantum computing processes, the influence of the environment on them and the stabilization of states to prevent or reduce errors in quantum computing.

**Keywords:** spin dynamics; NMR; quantum information; qubit; quantum logic operations

*Received 26 February 2024; revised 12 March 2024; accepted 12 March 2024*

doi: 10.17072/1994-3598-2024-2-05-18

## 1. Введение

Квантовые свойства микрообъектов: электронов, нейтральных атомов и молекул, ионов и фотонов, – давно используются в физических приборах и технических устройствах, таких как туннельный диод, оптическое волокно, сканирующий туннельный микроскоп, сверхпроводящие контакты Джозефсона, и др. В настоящее время бурно развивается область информационных технологий, также связанная с квантовыми эффектами: квантовая телепортация и квантовая криптография, вычислительные процедуры в квантовых компьютерах. Остановимся на последней области.

При проведении квантовых вычислений выделяют три этапа: подготовка квантового состояния, проведение квантовых логических операций и считывание (измерение) конечного состояния. Поскольку микрообъект, являющийся носителем квантовой информации, подвержен случайным воздействиям со стороны окружения, на всех этапах возможен уход объекта из требуемого состояния, что в конечном итоге приводит к появлению ошибок при вычислениях. Борьба с ошибками затруднительна, поскольку, в соответствии с физическими законами, проследить за промежуточными состояниями квантового объекта невозможно: при проведении измерения состояние квантового объекта разрушается, поэтому измерению подлежит только конечное состояние.

Но то, что запрещено в реальном эксперименте, возможно в эксперименте на компьютерной модели. Известно, что гораздо эффективнее устранять или хотя бы уменьшать влияние ошибок, чем исправлять их [1]. Здесь важно создать адекватную математическую модель процесса. Данная работа посвящена развитию одного из возможных подходов для построения таких моделей. Динамику про-

цесса предлагается описывать с помощью уравнений для наблюдаемых величин, параметризующих матрицу плотности квантовой системы, состоящей из частиц, обладающих спином  $\frac{1}{2}$ , помещённых в магнитное поле, формирующее энергетические уровни.

В разделе 2 описываются некоторые логические операции над классическими битами, рассматриваемыми как различные состояния физического объекта. Приводится описание состояния квантового бита (кубита), как вектора в двумерном гильбертовом пространстве, которому соответствует точка на сфере Блоха. Приводятся примеры квантовых логических операций как унитарных поворотов на сфере Блоха. Также приводятся примеры унитарных матриц, соответствующих двухкубитовым операциям.

Раздел 3 посвящён описанию динамики кубитов с помощью формализма матрицы плотности чистых состояний. Показан вывод уравнений движения для наблюдаемых, каковыми являются средние значения операторов физических величин, описывающих состояние системы. Приводятся примеры микрообъектов, на которых могут быть реализованы кубиты, и способы реализации квантовых операций (гейтов).

В разделе 4 исследуется динамика спина  $\frac{1}{2}$  в магнитных полях, показан вывод динамического уравнения для вектора спиновой поляризации, являющегося единичным вектором в реальном трёхмерном пространстве. Приводится соответствие состояния кубита, как вектора в гильбертовом пространстве, вектору поляризации. Показано поведение вектора поляризации во вращающейся системе координат. Приведены форма и параметры радиочастотных импульсов, реализующих однокубитовые операции.

Раздел 5 содержит описание системы двух взаимодействующих спинов  $\frac{1}{2}$ . Приводится выраже-

ние для матрицы плотности и гамильтониана системы при скалярном косвенном взаимодействии магнитных моментов ядер через электронные оболочки атомов в молекуле. Выводятся эволюционные уравнения для средних дипольных моментов и квадрупольного момента системы. Показано, что в случае слабого взаимодействия динамика системы может быть описана с помощью замкнутой системы уравнений для средних дипольных моментов, совпадающих для этого случая с векторами спиновых поляризации отдельных спинов.

Приведены примеры численного решения полученных уравнений, описывающих однокубитовые и двухкубитовые операции, подтверждающие адекватность созданной математической модели и возможность её применения для компьютерного моделирования процессов квантовых вычислений, влияния на них окружения и стабилизации состояний для предотвращения или уменьшения ошибок при квантовых вычислениях.

## 2. Классические и квантовые биты

### 2.1. Классические биты и операции над ними

Бит – минимальная единица измерения информации. Когда мы говорим о реализации способов обработки информации, то под устройством, хранящим один бит, имеем в виду физическое устройство, которое может находиться в двух состояниях, например: «включено» / «выключено». Обозначим состояние «выключено» через (A), а состояние «включено» – через (B). В таком случае «операция над битом» будет означать перевод устройства (объекта, системы) из одного состояния в другое. Очевидно, что возможны всего две *однобитовые операции*:

- в результате операции состояние объекта не меняется (тождественная операция);
- состояние объекта изменяется на противоположное (операция NOT):

$$\begin{aligned} \text{NOT}(A)=(B), \text{NOT}(B)=(A), \\ \text{NOT}(\text{NOT}(A))=(A). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Из (2.1) следует, что повторное проведение операции NOT приводит к тождественной операции.

В системе из двух битов возможны 4 состояния: (AA), (AB), (BA), (BB). При отсутствии связи между битами возможны побитовые преобразования внутри пары, которые описаны выше. Под *двухбитовыми операциями* будем подразумевать преобразования, в которых существует связь между битами, и поэтому исход операции для каждого бита зависит, вообще говоря, от состояния другого бита. Назовём две таких операции:

- операция обмена состояниями SWAP:

$$\begin{aligned} \text{SWAP}(AB)=(BA), \\ \text{SWAP}(BA)=(AB), \end{aligned} \quad (2.2)$$

- операция «управляемое НЕ» (CNOT):

$$\begin{aligned} \text{CNOT}(AA)=(AA), \text{CNOT}(AB)=(AB), \\ \text{CNOT}(BA)=(BB), \text{CNOT}(BB)=(BA). \end{aligned} \quad (2.3)$$

При операции CNOT преобразуется только состояние второго (управляемого или *целевого*) бита, состояние первого (*управляющего*) бита остается без изменений, но оно влияет на конечное состояние второго бита: если 1-й бит находится в состоянии (A), состояние 2-го бита не меняется, если 1-й бит находится в состоянии (B), состояние 2-го бита изменяется на противоположное. Очевидно, что повторные применения операций SWAP и CNOT приводят к тождественной операции.

### 2.2. Квантовые биты (кубиты)

**2.2.1. Описание состояний двухуровневых систем в квантовой механике.** Квантовый бит, как и классический, может находиться в двух состояниях (A) и (B), однако, в отличие от классического бита, он находится в обоих состояниях *одновременно*, что обусловлено квантовой природой объектов, реализующих кубиты. Состояния (A) и (B) называются *базисными*, а состояние кубита  $\psi$  является *линейной суперпозицией* этих состояний:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = \alpha|A\rangle + \beta|B\rangle, \\ \langle\psi| = \langle A|\alpha^* + \langle B|\beta^*. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Здесь  $\alpha$  и  $\beta$  – комплексные числа (символ «\*» означает знак комплексного сопряжения), а векторы  $|A\rangle$  и  $|B\rangle$  представляют собой базисные векторы двумерного гильбертова пространства:

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |B\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad (2.5)$$

$$\langle A| = (1 \ 0), \quad \langle B| = (0 \ 1).$$

Формулы (2.4) с учётом обозначений (2.5) можно записать в виде:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}; \quad \langle\psi| = (\alpha^* \ \beta^*). \quad (2.6)$$

Поскольку вектор  $|\psi\rangle$  описывает состояние реального квантового объекта, он должен быть нормирован на единицу, т.е. скалярное произведение бра-вектора  $\langle\psi|$  и кет-вектора  $|\psi\rangle$  должно быть равно 1:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (2.7)$$

Подставляя выражения (2.6) в соотношение (2.7), получим:

$$\begin{aligned} (\alpha^* \quad \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} &= \alpha^* \cdot \alpha + \beta^* \cdot \beta = \\ &= |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Соотношение (2.8), следующее из самой природы квантовых объектов, имеет глубокий физический смысл, относящийся к процедуре экспериментального определения (измерения) состояния этого объекта. Микрообъект, обладающий квантовыми свойствами, может находиться в *любом* суперпозиционном (чистом) состоянии, описываемом вектором волновой функции (2.4), где комплексные числа  $\alpha$  и  $\beta$  связаны соотношением (2.8), однако, при измерении это состояние *разрушается*, и объект обнаруживается только в *одном* из базисных состояний, а именно: в состоянии  $|A\rangle$  с вероятностью  $|\alpha|^2$  или в состоянии  $|B\rangle$  с вероятностью  $|\beta|^2$ . Комплексные числа  $\alpha$  и  $\beta$  называются *амплитудами вероятностей*.

Операция над кубитом (2.4) состоит в его переводе из одного состояния в другое. В отличие от классического бита, количество таких операций (преобразований вектора  $|\psi\rangle$ ) бесконечно. Преобразования векторов 2-мерного гильбертова пространства осуществляются с помощью матриц размерности  $2 \times 2$ :  $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ . Вектор  $|\psi'\rangle$ , получившийся в результате преобразования, также должен быть нормирован на единицу:

$$\langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle = 1.$$

Отсюда вытекает требование к матрицам  $U$ :

$$U^\dagger U = I, I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Таким образом, операции над кубитами производятся с помощью *унитарных* матриц размерности  $2 \times 2$ .

Из соотношения (2.8) следует, что четыре вещественных числа, определяющих амплитуды вероятностей, связаны между собой, следовательно, состояние (2.6) описывается тремя независимыми вещественными параметрами, которые можно ввести так:

$$\alpha = \cos \tilde{\theta} \cdot e^{i\varphi_\alpha}, \quad \beta = \sin \tilde{\theta} \cdot e^{i\varphi_\beta}.$$

Если ввести *относительную фазу*  $\tilde{\varphi} = \varphi_\beta - \varphi_\alpha$ , то выражение (2.6), описывающее чистое состояние кубита, примет вид

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos \tilde{\theta} \\ \sin \tilde{\theta} \cdot e^{i\tilde{\varphi}} \end{pmatrix} \cdot e^{i\varphi_\alpha}. \quad (2.10)$$

Абсолютная фаза  $\varphi_\alpha$  не влияет на результаты эксперимента, и её обычно полагают равной нулю.

Состояние кубита (2.10) при  $\varphi_\alpha = 0$  можно изобразить графически в виде точки на сфере единичного радиуса, которую называют *сферой Блоха* (рис. 1). Полярный угол  $\tilde{\theta}$  сферической системы координат определяет направление вектора состояния относительно оси  $\zeta$ , а азимутальный угол  $\tilde{\varphi}$  определяет фазу направления проекции точки на комплексную плоскость  $(\xi, \eta)$ .

Унитарные преобразования (2.9) осуществляют повороты вектора состояния, т.е. перемещения точки на сфере Блоха.

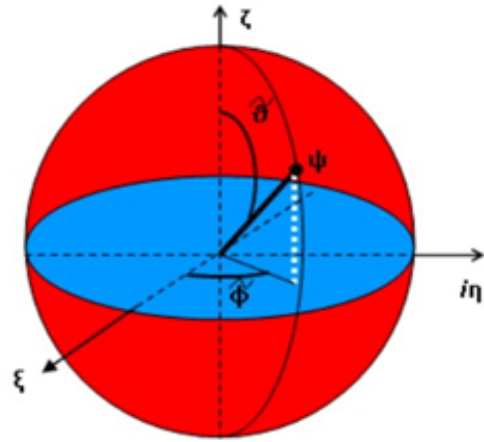


Рис. 1. Сфера Блоха

**2.2.2. Однокубитовые операции.** Унитарная матрица

$$\Xi = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

применённая к базисным состояниям (2.5), приводит к преобразованиям:

$$\Xi|A\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |B\rangle;$$

$$\Xi|B\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |A\rangle.$$

Таким образом, матрица (2.11) переводит исходное базисное состояние в противоположное ему, т.е. осуществляет *квантовую логическую операцию NOT*:  $\Xi = NOT$  (гейт NOT). Эта операция является обратной самой себе.

Отметим, что базисному состоянию  $|A\rangle$ , в соответствии с (2.10), соответствуют сферические координаты  $\tilde{\theta} = 0, \tilde{\varphi} = 0$ , а состоянию  $|B\rangle$  – коор-

динаты  $\tilde{\theta} = \pi/2, \tilde{\varphi} = 0$ . Следовательно, операция NOT производит повороты на  $\pm\pi/2$  вокруг оси  $\eta$ .

Состояния кубита для  $\tilde{\theta} = \pi/4, \tilde{\varphi} = 0$  и  $\tilde{\theta} = \pi/4, \tilde{\varphi} = \pi$  описываются векторами

$$\begin{aligned} |H_+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle + |B\rangle), \\ |H_-\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle - |B\rangle). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Преобразования, осуществляющие повороты на сфере Блоха на углы  $\pi/4$ , описываются матрицей

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} H|A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |H_+\rangle, \\ H|B\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |H_-\rangle. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Преобразования (2.14) называются преобразованиями Адамара (Hadamard's gate).

**2.2.3. Двухкубитовые операции.** Базисные состояния системы двух кубитов являются прямыми произведениями базисных векторов отдельных кубитов 1 и 2:

$$\begin{aligned} |AA\rangle &= |A_1\rangle \otimes |A_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |AB\rangle &= |A_1\rangle \otimes |B_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |BA\rangle &= |B_1\rangle \otimes |A_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |BB\rangle &= |B_1\rangle \otimes |B_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Линейная комбинация 2-го и 3-го базисных состояний

$$|\psi_{EPR}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|AB\rangle - |BA\rangle) \quad (2.16)$$

описывает состояние квантовой системы, не имеющее аналогов для классических систем. Для вектора (2.16) невозможно однозначно указать, в каком из состояний находится каждый из кубитов, входящих в систему. Состояние  $|\psi_{EPR}\rangle$  называется перепутанным (entangled), или ЭПР-парой. Именно перепутанные состояния позволяют ускорить проведение вычислительных процедур в квантовых компьютерах по сравнению с классическими, поэтому явление запутывания играет здесь важную роль.

Квантовой логической операции  $SWAP|AB\rangle = |BA\rangle$  в базисе (2.15) соответствует матрица 4x4:

$$SWAP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Операция CNOT описывается матрицей

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Результаты действия матрицы (2.18) на базисные векторы (2.15) описываются выражениями (2.3).

Перепутанное состояние (2.16) может быть получено из 2-го базисного вектора (2.15) следующими преобразованиями:

$$\begin{aligned} CNOT \cdot (H_- \otimes I) |AB\rangle &= \\ &= CNOT \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle - |B\rangle) \otimes |B\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|AB\rangle - |BA\rangle) = |\psi_{EPR}\rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Сначала преобразование Адамара действует только на 1-й кубит, а затем – на полученное состояние действует оператор CNOT.

Утверждается, что вычислительные операции в системе более чем из двух кубитов можно выполнить с помощью универсальных наборов квантовых логических элементов [2]. В качестве такого универсального набора могут выступать унитарные вращения состояния отдельного кубита и двухкубитовая операция CNOT.

### 3. Динамика кубитов

#### 3.1. Матрица плотности двухуровневых систем

Для составления уравнений движения кубита (динамических, или *эволюционных* уравнений) удобно использовать формализм матрицы плотности [3]. Для чистых состояний (которые мы только и будем рассматривать) двухуровневых систем матрица плотности записывается в виде:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \cdot (\alpha^* \quad \beta^*) = \begin{pmatrix} \alpha\alpha^* & \alpha\beta^* \\ \beta\alpha^* & \beta\beta^* \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Диагональные элементы матрицы плотности равны вероятностям обнаружить при измерении кубит в соответствующем базисном состоянии. Из определения (3.1) и нормированности вектора  $|\psi\rangle$  следуют свойства матрицы плотности:

$$\begin{aligned} Sp\rho &= \langle\psi|\psi\rangle = 1, \\ Sp\rho^2 &= Sp|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = Sp\rho = 1. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Очевидно, что матрица плотности может быть параметризована с помощью трёх вещественных чисел, которые для матрицы 2x2 являются суть коэффициентами разложения по полному набору унитарных матриц с равным нулю следом:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2}(I + m_x\sigma_x + m_y\sigma_y + m_z\sigma_z) = \\ &= \frac{1}{2}(I + \vec{m} \cdot \vec{\sigma}). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Здесь компоненты вектора  $\vec{\sigma} = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$  представляют собой набор *матриц Паули*:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Матрицы Паули обладают свойствами:

$$\begin{aligned} \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i &\equiv [\sigma_i, \sigma_j] = 2ie_{ijk}\sigma_k; \\ Sp\sigma_i &= 0; Sp\sigma_i\sigma_j = 2\delta_{ij}; \\ Sp\sigma_i\sigma_j\sigma_k &= 2ie_{ijk}, \quad i, j, k = x, y, z. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Из свойств матрицы плотности (3.2) и свойств матриц Паули (3.5) следуют соотношения для вектора  $\vec{m}$ :

$$\vec{m} = Sp\rho\vec{\sigma} = \langle\psi|\vec{\sigma}|\psi\rangle; \quad (3.6)$$

$$\vec{m}^2 = 1. \quad (3.7)$$

Таким образом,  $\vec{m}$  является единичным вектором, равным среднему значению квантового оператора  $\vec{\sigma}$ .

Подставляя в равенство (3.6) последовательно три матрицы Паули (3.4) и выражение для кубита (2.6), найдем:

$$\begin{aligned} m_x &= \sin\mathcal{G}\cos\varphi; \\ m_y &= \sin\mathcal{G}\sin\varphi; \\ m_z &= \cos\mathcal{G}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

где обозначено:

$$\mathcal{G} = 2\tilde{\mathcal{G}}, \varphi = \tilde{\varphi}. \quad (3.9)$$

Выражения (3.8) и (3.9) показывают, что вектор  $\vec{m}$  определён в обычном трёхмерном евклидовом пространстве, причём полярный угол этого вектора в сферических координатах в два раза больше полярного угла положения точки на сфере Блоха.

#### 3.2. Уравнения для матрицы плотности и наблюдаемых

Поскольку вектор состояния кубита  $|\psi\rangle$  подчиняется уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle; \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = \langle\psi|\hat{H}^\dagger, \quad (3.10)$$

где  $\hbar = 1.05457 \cdot 10^{-27}$  эрг·с – постоянная Планка (здесь и далее используется система СГСМ), а эрмитов оператор  $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$  является оператором полной энергии системы (гамильтониан), то, дифференцируя выражение (3.1) по времени, находим динамическое уравнение для матрицы плотности:

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = \hat{H}\rho - \rho\hat{H} \equiv [\hat{H}, \rho]. \quad (3.11)$$

С помощью уравнения (3.11) можно найти динамические уравнения для средних значений любых физических величин, связанных с системой, которым соответствуют определенные квантовомеханические операторы (уравнения для наблюдаемых – *уравнения Эренфеста*). Для этого нужно уравнение (3.11) умножить на матрицу, соответствующую оператору в выбранном базисе, и взять след от обеих частей уравнения.

Если данную операцию проделать для вектора, составленного из матриц Паули, то, в соответствии с (3.6), получим дифференциальное уравнение для вектора  $\vec{m}$ :

$$i\hbar\dot{\vec{m}} = Sp[\hat{H}, \rho]\vec{\sigma} = Sp\rho[\vec{\sigma}, \hat{H}]. \quad (3.12)$$

Конкретный вид уравнения (3.12) определяется гамильтонианом  $\hat{H}$ , т.е. определяется физической природой микрообъекта, на котором реализован кубит. В табл. 1 для справок приведены некоторые примеры квантовых систем, на двухуровневых состояниях которых реализованы кубиты [4].

Табл. 1. Способы реализации кубитов и управляющих воздействий

№ п/п	Физический объект	Квантовые состояния	Воздействия, вызывающие переходы между уровнями
1	Частицы со спином $\frac{1}{2}$ в постоянном магнитном поле (спины атомных ядер или электронов)	Уровни энергии магнитного момента, связанного со спином	Импульсы переменного магнитного поля на резонансных частотах определенной длительности (радиочастотные импульсы)
2	Ионы или атомы в магнитных ловушках	Энергетические уровни электронов на внешних оболочках	Импульсы оптического лазерного излучения
3	Ядерные спины в квантовых точках с несколькими электронами	Энергия магнитного момента ядер в магнитном поле, спин-электронные взаимодействия	Радиочастотные импульсы и импульсы инфракрасного излучения
4	Сверхпроводники (макроскопические квантовые состояния)	Зарядовые состояния куперовских пар, связанные с внешней схемой переходами Джозефсона	Электрические импульсы (изменение напряжения на затворе схемы)

Наиболее наглядной динамика кубитов представляется для спинов  $\frac{1}{2}$  в магнитном поле, которые мы и рассмотрим. Заметим, что для кубитов другой физической природы также существует геометрическое представление *фиктивного спина* на сфере Блоха, однако в этом случае динамика системы не связана с движением объекта в реальном пространстве.

#### 4. Спин $\frac{1}{2}$ в магнитном поле

##### 4.1. Уравнение движения для вектора поляризации спина $\frac{1}{2}$

Замечательное свойство матриц Паули состоит в том, что они являются квантово-механическими операторами проекций вектора собственного механического момента микрочастицы  $\vec{S}$ , равного  $\hbar/2$  (спин  $\frac{1}{2}$ ), в базисе, формируемым постоянным магнитным полем  $\vec{H}_0$ :

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}. \tag{4.1}$$

Частица, обладающая спином, имеет магнитный момент

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S}, \tag{4.2}$$

где  $\gamma$  – *гиромагнитное отношение*. Гиромагнитное отношение обратно пропорционально массе частицы, поэтому величина  $\gamma$  электрона почти в две тысячи раз больше, чем протона, кроме того, эти величины отличаются знаком. Для определенности будем рассматривать *ядерные* спины. Гиромагнитные отношения для наиболее употребительных в экспериментальных исследованиях ядер со спином  $\frac{1}{2}$  приведены в табл. 2.

Магнитный момент частицы, помещенной в постоянное магнитное поле, стремится сориентироваться вдоль направления этого поля, энергия взаимодействия  $E = -\vec{\mu}\vec{H}_0$ , поэтому гамильтониан спина  $\frac{1}{2}$  в магнитном поле имеет вид:

$$\hat{H} = -\gamma \hat{S} \vec{H}_0 = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 (\vec{\sigma} \vec{n}), \quad \omega_0 = \gamma H_0. \tag{4.3}$$

Табл. 2. Гиромагнитные отношения некоторых ядер

Ядро	Гиромагнитное отношение $\gamma / 2\pi$ , кГц/Э
$^1\text{H}$ (протон)	4.2577
$^{13}\text{C}$	1.0708
$^{31}\text{P}$	1.7235

Если ось  $Z$  лабораторной системы координат выбрать вдоль магнитного поля:  $\vec{n} = \vec{k} = (0, 0, 1)$ , то гамильтониан (4.3) примет вид

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z.$$

В этом случае собственные значения энергии системы описываются собственными значениями матрицы  $\sigma_z$ , равными  $\pm 1$ , а собственные векторы этой матрицы (2.5) соответствуют двум состояниям:

- базисному состоянию А с наименьшей энергией  $-\hbar\omega_0/2$  (основное состояние) соответствует ориентация спина по направлению поля («спин вверх»);
- второму базисному состоянию В с энергией  $+\hbar\omega_0/2$  (возбуждённое состояние) соответствует ориентация спина против поля («спин вниз»). Расстояние между уровнями  $\hbar\omega_0$  определяется величиной магнитного поля.

Важно отметить, что единичный вектор  $\vec{m}$  в выражении (3.6) для спина  $1/2$  задает направление реального вектора – квантово-механического среднего значения магнитного момента частицы. Вектор  $\vec{m}$  в данном случае будем называть *вектором спиновой поляризации*. Базисным состояниям кубита (2.5) соответствуют ориентации вектора  $\vec{m}$  вдоль оси  $Z$  или против оси  $Z$ :

$$\begin{aligned} |A\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \vec{m} = (0, 0, +1); \\ |B\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \vec{m} = (0, 0, -1). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Заметим, что компоненты вектора  $\vec{m}$  записаны здесь в строку из соображения удобства и компактности обозначений, при проведении матричных операций в евклидовом пространстве эти компоненты, разумеется, должны располагаться в виде столбца.

Если на спин кроме постоянного поля  $\vec{H}_0$  действует также переменное магнитное поле  $\vec{h}(t)$ , то для суммарного поля

$$\vec{H} = \vec{H}_0 + \vec{h}(t) \quad (4.5)$$

гамильтониан (4.3) примет вид

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\gamma\hbar(\vec{\sigma}\vec{H}).$$

Подставив это выражение для гамильтониана в (3.12) и используя свойства матриц Паули (3.5), для вектора  $\vec{m}$  получим уравнение

$$\dot{\vec{m}} = \gamma(\vec{m} \times \vec{H}). \quad (4.6)$$

Для постоянного поля  $\vec{H}_0 = H_0\vec{k} = (0, 0, H_0)$  уравнения для компонент вектора  $\vec{m}$ , в соответствии с (4.6), (4.3), примут вид

$$\begin{aligned} \dot{m}_x &= \omega_0 m_y, \quad \dot{m}_y = -\omega_0 m_x, \\ \dot{m}_z &= 0. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Пусть в начальный момент (при включении поля) вектор  $\vec{m}$  располагался в плоскости  $XZ$  лабораторной системы координат (ЛСК):

$$\begin{aligned} \vec{m}(0) &= (m_\perp, 0, m_\parallel), \\ m_\perp^2 + m_\parallel^2 &= 1. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Тогда решение уравнений (4.7) для вектора  $\vec{m}$  примет вид

$$\vec{m}(t) = \begin{pmatrix} m_\perp \cos \omega_0 t \\ -m_\perp \sin \omega_0 t \\ m_\parallel \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Полученное решение говорит о том, что продольная составляющая  $m_\parallel$  вектора  $\vec{m}$  остаётся постоянной, а поперечная составляющая сохраняет свою длину  $m_\perp$ , но вращается с частотой  $\omega_0$  (ларморовой частотой) в плоскости  $XY$  по часовой стрелке, если смотреть со стороны положительного направления оси  $Z$ . Другими словами, вектор  $\vec{m}$  совершает прецессию вокруг постоянного поля  $\vec{H}_0$  с ларморовой частотой  $\omega_0 = \gamma H_0$  по направлению левого винта.

Поведение вектора  $\vec{m}$  в постоянном магнитном поле можно наглядно представить, совершив переход во *вращающуюся систему координат* (ВСК) по правилу [5]:

$$\begin{aligned} \vec{m}' &= \bar{D}(\omega_0)\vec{m}, \\ \bar{D}(\omega_0) &= \begin{pmatrix} \cos \omega_0 t & -\sin \omega_0 t & 0 \\ \sin \omega_0 t & \cos \omega_0 t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Матрица  $\bar{D}$  описывает вращение ВСК вокруг оси  $Z$  лабораторной системы координат с угловой скоростью  $-\omega_0$  (в [5] принято противоположное направление вращения ВСК, поэтому ларморова частота определена как  $\omega_0 = -\gamma H_0$ ). Применив преобразование (4.10) к решению (4.9), найдём компоненты вектора  $\vec{m}$  в ВСК:  $\vec{m}' = (m_\perp, 0, m_\parallel)$ , т.е. вектор поляризации во вращающейся системе координат остаётся неподвижным, поскольку вращается вместе с её осями.

Стоит заметить, что точное задание компонент вектора спиновой поляризации не противоречит правилам квантовой механики. По этим компонентам, согласно (3.8), можно определить углы ориентации  $\vartheta, \varphi$  вектора  $\vec{m}$  в трёхмерном пространстве, а затем найти состояние кубита (2.10), определив углы  $\tilde{\vartheta}, \tilde{\varphi}$  из соотношений (3.9). При проведении измерений кубит может быть обнаружен в базисном состоянии  $|A\rangle$  с вероятностью  $\cos^2 \vartheta/2$  или в состоянии  $|B\rangle$  с вероятностью  $\sin^2 \vartheta/2$ , состояние  $\vec{m}$  при этом разрушится, поскольку будет спроектировано (коллапсирует, редуцируется) на соответствующее базисное состояние. Очевидно, что найденные значения вероятностей совпадают с диагональными элементами матрицы плотности (3.3), равными  $(1 \pm m_z)/2 = (1 \pm \cos \vartheta)/2$ , как и должно быть.

Модель (4.6) позволяет проследить за динамикой вектора поляризации, а, значит, и за поведением кубита, как в постоянных, так и в переменных магнитных полях, и определить конечное состояние кубита к моменту проведения измерений.



#### 4.2. Спин 1/2 в переменном магнитном поле

Рассмотрим поведение спина 1/2 в магнитном поле, вращающемся в плоскости XY с частотой  $\omega_0$ :

$$\begin{aligned} \vec{H} &= \vec{H}_0 + \vec{h}_R(t), \\ \vec{h}_R(t) &= h_R(\cos(\omega_0 t + \varphi_R), -\sin(\omega_0 t + \varphi_R), 0). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Здесь  $h_R, \varphi_R$  – амплитуда и начальная фаза вращающегося поля. Для анализа движения вектора поляризации запишем уравнение (4.6) в матричной форме:

$$\begin{aligned} \dot{\vec{m}} &= \vec{A}(t) \cdot \vec{m}, \quad \vec{A}(t) = \vec{A}_0 + \vec{a}(t); \\ \vec{A}_0 &= \omega_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \vec{a}(t) &= \omega_R \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sin \Phi \\ 0 & 0 & -\cos \Phi \\ -\sin \Phi & \cos \Phi & 0 \end{pmatrix}, \\ \Phi &= \omega_0 t + \varphi_R, \quad \omega_R = \gamma h_R. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Перейдём во вращающуюся систему координат, для чего продифференцируем (4.10) по времени, учитывая, что матрица  $\vec{D}$  тоже зависит от времени:  $\dot{\vec{m}}' = \vec{D}\dot{\vec{m}} + \vec{D}\dot{\vec{m}}$ . Выразив  $\vec{m}$  через  $\vec{m}'$  с помощью преобразования, обратного к (4.10), найдём уравнение для вектора поляризации во вращающейся системе координат:

$$\dot{\vec{m}}' = \vec{A}' \vec{m}', \quad \vec{A}' = \left( \vec{D} + \vec{D} \cdot \vec{A} \right) \cdot \vec{D}^{-1}. \quad (4.13)$$

Вид матрицы  $\vec{A}'$  зависит от начальной фазы вращающегося поля:

$$\begin{aligned} \vec{A}' &= \omega_R \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_R = 0; \\ \vec{A}' &= \omega_R \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_R = \frac{\pi}{2}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Сразу отметим, что матрица  $\vec{A}'$  в любом случае не зависит от величины постоянного поля  $\vec{H}_0$ , т.е. во вращающейся системе координат спин «не чувствует» это поле, на него оказывает влияние только амплитуда переменного вращающегося поля.

Используя вид матрицы  $\vec{A}'$ , находим уравнения для компонент вектора спиновой поляризации в ВСК при различных значениях фазы:

$$\varphi_R = 0: \quad \dot{m}'_x = 0; \quad \dot{m}'_y = \omega_R m'_z; \quad \dot{m}'_z = -\omega_R m'_y; \quad (4.15a)$$

$$\varphi_R = \frac{\pi}{2}: \quad \dot{m}'_x = \omega_R m'_z; \quad \dot{m}'_y = 0; \quad \dot{m}'_z = -\omega_R m'_x. \quad (4.15b)$$

Сравнивая с уравнениями (4.7), находим, что уравнения (4.15a) описывают прецессию вектора  $\vec{m}'$  вокруг оси -X ВСК, а уравнения (4.15b) – вокруг оси Y ВСК. В том и в другом случае прецессия происходит с циклической частотой

$$\omega_R = \gamma h_R, \quad (4.16)$$

которая в данном случае называется *частотой Раби*.

Если спин в момент включения переменного поля (4.11) находился в состоянии  $\vec{m} = (0, 0, +1)$ , то спустя время  $\tau$ , определяемое из условия:

$$\omega_R \tau = \pi, \quad (4.17)$$

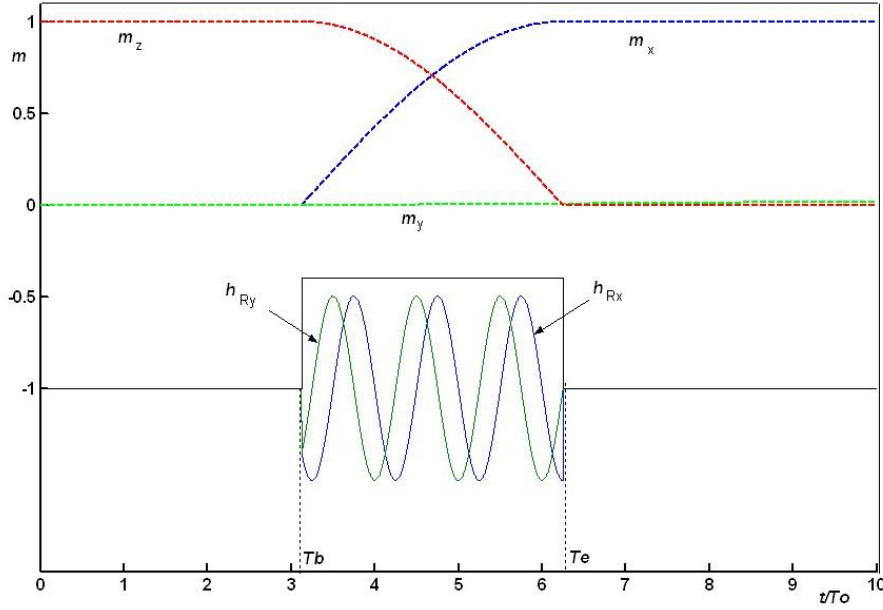
он окажется в состоянии  $\vec{m} = (0, 0, -1)$ , что для кубита, в соответствии с (4.4), означает переход  $|A\rangle \rightarrow |B\rangle$ . Итак, импульс переменного магнитного поля (вращающегося в поперечной к постоянному магнитному полю плоскости) на *резонансной* частоте  $\omega_0$  длительностью, удовлетворяющей условию (4.17) ( $\pi$ -импульс, или  $Y_{180}$ -импульс), осуществляет над кубитом логическую операцию NOT.

Резонансные частоты для ядер в магнитных полях напряженностью  $10^4 \dots 10^5$  Э (индукция  $1 \dots 10$  Тл), обычно применяемых в экспериментах, составляют десятки и сотни МГц (см. табл. 2), что соответствует частотам радиоволнового диапазона. Хотя в случае магнитного резонанса переменное поле формируется катушками индуктивности без излучения электромагнитных волн, управляющие импульсы всё равно называют *радиочастотными*.

Формы радиочастотных импульсов, осуществляющих преобразование основного базисного состояния кубита, приведены в табл. 3.

**Табл. 3.** Параметры радиочастотных импульсов (4.11),  $0 < t < \tau$

$\omega_R \tau$	$\varphi_R$	Ось вращения в ВСК	Логическая операция
$\pi$	0	-X	NOT
$\pi$	$\frac{\pi}{2}$	Y	NOT
$\frac{\pi}{2}$	0	-X	H
$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$	Y	H



**Рис. 2.** Поведение составляющих вектора спиновой поляризации  $\vec{m}$  в ВСК под действием радиочастотного  $\frac{\pi}{2}$ -импульса  $\vec{h}_R(t)$

На рис. 2 приведены графики, показывающие поведение продольной компоненты  $m_z$  и поперечных составляющих  $m_x, m_y$  вектора спиновой поляризации при действии радиочастотного  $\pi/2$ -импульса, вызывающего вращение вокруг отрицательного направления оси X ВСК ( $-X_{90}$  импульс). Графики составляющих вектора  $\vec{m}$  в ВСК изображены прерывистыми линиями, графики поперечных компонент вращающегося магнитного поля в ЛСК – сплошными. Состояние кубита в начале действия импульса  $T_b$  описывается вектором  $\vec{m}(T_b) = (0, 0, 1)$ , в момент окончания действия импульса  $T_e$  кубит переходит в состояние  $\vec{m}(T_e) = (1, 0, 0)$ . Очевидно, что импульс совершает преобразование Адамара  $|A\rangle \rightarrow |H_+\rangle$  (см. (2.14)).

Графики получены с помощью численного решения векторного уравнения (4.6) с полем (4.11) при следующих значениях параметров:  $\omega_R / \omega_0 = 0.08$ ,  $\varphi_R = \pi / 2$ ,  $\omega_R \cdot (T_e - T_b) = \pi / 2$ .

В выражениях (4.11) присутствуют внешние магнитные поля, созданные в лабораторных условиях. Взаимодействие спина с окружением, приводящее к непредсказуемым переходам между уровнями, т.е. вызывающее ошибки в квантовых вычислительных операциях, должно рассматриваться на квантовом уровне. Однако в *полуклассическом подходе*, который широко применяется в теории магнитного резонанса и релаксации (см., например, [6]), поведение окружения (решётки) рассматривается классически: квантовые операторы, соответствующие решёточным величинам, заменяются их средними значениями.

Для спина  $1/2$  в разложении по мультипольным моментам отсутствуют спин-тензоры ранга выше 1, поэтому *все энергетические взаимодействия в полуклассическом подходе моделируются взаимодействием оператора спина с магнитным полем*. Таким образом, для изучения влияния помех, созданных окружением кубита, к магнитному полю  $\vec{H}$  в уравнении (4.6) достаточно добавить случайную составляющую [7]

$$\vec{h}_{rand}(t) = (h_{xrand}(t), h_{yrand}(t), h_{zrand}(t)). \quad (4.18)$$

Поперечные составляющие случайного поля  $h_{xrand}(t), h_{yrand}(t)$ , имеющие в своих спектрах резонансную частоту  $\omega_0$ , будут вызывать изменения продольной составляющей вектора поляризации, приводящие к *диссипативным* процессам. Продольная составляющая случайного поля  $h_{zrand}(t)$  обуславливает изменения частоты ларморовой прецессии, приводящие к расфазировке, т.е. вызывает *декогерентизацию* в системе кубитов.

Здесь мы не будем учитывать наличие случайных воздействий, но надо иметь в виду, что исследование динамики кубита, описываемой уравнением (4.6), в поле

$$\vec{H} = \vec{H}_0 + \vec{h}_R(t) + \vec{h}_{rand}(t) \quad (4.19)$$

позволяет моделировать как сами логические операции в процессе квантовых вычислений, так и влияние помех, приводящих к ошибкам в квантовых вычислениях, и обрабатывать методы компенсации этих помех.

## 5. Два взаимодействующих спина

### 5.1. Гамильтониан и матрица плотности

Гамильтониан системы двух спинов  $\frac{1}{2}$  с различными гиромагнитными отношениями  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  (гетероядерная система), находящихся в магнитных полях (4.19), в базисе (2.15) при отсутствии взаимодействия между спинами записывается в виде:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar\omega_{01}}{2}\bar{B}_1 \cdot \vec{\sigma}_1 \otimes I_2 - \frac{\hbar\omega_{02}}{2}\bar{B}_2 \cdot I_1 \otimes \vec{\sigma}_2. \quad (5.1)$$

Обезразмеренные магнитные поля  $\bar{B}_1, \bar{B}_2$  при отсутствии случайных помех ( $\bar{h}_{rand} = 0$ ) имеют вид

$$\bar{B}_n = \vec{k} + \alpha_n \vec{e}_n(t), \quad n = 1, 2. \quad (5.2)$$

В формулах (5.1) и (5.2) введены обозначения:

$$\omega_{0n} = \gamma_n H_0; \quad \alpha_n = \frac{h_{Rn}}{H_0}, \quad (5.3)$$

$$\vec{e}_n(t) = (\cos(\omega_{0n}t + \varphi_{Rn}), -\sin(\omega_{0n}t + \varphi_{Rn}), 0).$$

Матрица плотности двух невзаимодействующих спинов выражается прямым произведением

$$\begin{aligned} \rho_0 &= \rho_1 \otimes \rho_2, \\ \rho_n &= \frac{1}{2}(I_n + \vec{m}_n \cdot \vec{\sigma}_n), \quad n = 1, 2. \end{aligned} \quad (5.4)$$

В развернутом виде для матрицы  $\rho_0$  получаем выражение:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= \frac{1}{4}(E + m_1^j(\sigma_1^j \otimes I_2) + m_2^j(I_1 \otimes \sigma_2^j) + \\ &+ m_1^j m_2^k(\sigma_1^j \otimes \sigma_2^k)), \end{aligned} \quad (5.5)$$

где  $E$  – единичная матрица  $4 \times 4$ ; по повторяющимся индексам векторных компонентов предполагается суммирование.

Подставляя выражения для гамильтониана (5.1) и для матрицы плотности (5.5) в (3.12), для векторов  $\vec{m}_1$  и  $\vec{m}_2$  получим два независимых уравнения:

$$\dot{\vec{m}}_n = \omega_{0n}(\vec{m}_n \times \bar{B}_n), \quad n = 1, 2. \quad (5.6)$$

Таким образом, спины ведут себя независимо, и однокубитовые операции выполняются над ними с помощью радиочастотных импульсов (4.11) на соответствующих резонансных частотах. Для выполнения двухкубитовых операций требуется взаимодействие между спинами.

При наличии взаимодействия матрица плотности  $4 \times 4$  уже не может быть представлена в виде прямого произведения матриц  $2 \times 2$ , соответствующих отдельным спинам. Нормированная матрица плотности для этой системы имеет 15 независимых компонентов, она может быть разложена по тензорным операторам, определённым в базисе (2.15):

$$\rho = \frac{1}{4}\left(E + \bar{P}_1 \cdot \hat{F}_1 + \bar{P}_2 \cdot \hat{F}_2 + \bar{G} \cdot \hat{Q}\right), \quad (5.7)$$

где тензорные операторы имеют вид

$$\hat{F}_1 = \vec{\sigma}_1 \otimes I_2, \quad \hat{F}_2 = I_1 \otimes \vec{\sigma}_2, \quad \hat{Q} = (\vec{\sigma}_1 \otimes \vec{\sigma}_2), \quad (5.8)$$

а  $\bar{P}_1, \bar{P}_2$  и  $\bar{G}$  представляют собой средние значения векторов спиновых поляризации (дипольные моменты – 6 координат) и тензора квадрупольного момента (9 составляющих) соответственно:

$$\bar{P}_1 = Sp \rho \hat{F}_1, \quad \bar{P}_2 = Sp \rho \hat{F}_2, \quad \bar{G} = Sp \rho \hat{Q}. \quad (5.9)$$

Диагональные элементы матрицы плотности (5.7), как всегда, равны вероятностям обнаружить при измерениях систему в одном из базисных состояний (2.15).

Взаимодействие между спинами может иметь характер прямого диполь-дипольного взаимодействия магнитных моментов ядер или косвенного взаимодействия через электронные оболочки атомов. При интенсивном броуновском вращении молекул в жидкости анизотропные части гамильтонианов усредняются до нуля, остаётся только изотропное (скалярное) взаимодействие. Гамильтониан системы при этом принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar\omega_{01}}{2}\bar{B}_1 \cdot \hat{F}_1 - \frac{\hbar\omega_{02}}{2}\bar{B}_2 \cdot \hat{F}_2 + \\ &+ \frac{1}{2}\hbar\Omega(\sigma_1^j \otimes \sigma_2^j), \end{aligned} \quad (5.10)$$

где  $\Omega$  – энергия взаимодействия в частотных единицах. Этот случай мы и рассмотрим.

### 5.2. Уравнения движения для средних значений

Если ввести собирательное обозначение для всех тензорных операторов  $\hat{Q} = \left\{ \hat{F}_1, \hat{F}_2, \hat{Q} \right\}$ , то уравнения движения (3.12) для средних значений  $\langle \hat{Q} \rangle = Sp \rho \hat{Q}$  запишутся в виде:

$$i\hbar \langle \dot{\hat{Q}} \rangle = Sp \rho \left[ \hat{Q}, \hat{H} \right]. \quad (5.11)$$

Коммутационные соотношения и следы произведения матриц тензорных операторов  $\hat{Q}$ , необходимые для вывода на основе (5.11) уравнений для средних, определяются с помощью свойств прямого произведения квадратных матриц [8]

$$\begin{aligned} (A \otimes B)(C \otimes D) &= (AC) \otimes (BD), \\ Sp(A \otimes B) &= Sp A \cdot Sp B \end{aligned} \quad (5.12)$$

и свойств матриц Паули (3.5). Используя их, получим:

$$\begin{aligned} [\hat{F}_n^j, \hat{F}_{n'}^{j'}] &= 2ie_{jj'} \hat{F}_n^k \delta_{nn'}; \\ [\hat{F}_n^j, \hat{Q}^{kk}] &= (-1)^n 2ie_{jk} \hat{Q}^{kk}; \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} [\hat{Q}^{jk}, \hat{Q}^{ll}] &= 2ie_{jkl} (\hat{F}_1^l - \hat{F}_2^l); \\ Sp \hat{F}_n^j \hat{F}_{n'}^k &= 4\delta_{jk} \delta_{nn'}; \\ Sp \hat{Q}^{jk} \hat{F}_n^{j'} &= 0; Sp \hat{Q}^{jk} \hat{Q}^{j'k'} = 4\delta_{jj'} \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Подставляя в (5.11) матрицу плотности (5.7) и гамильтониан (5.10) и используя выражения (5.13), (5.14), получаем уравнения для средних:

$$\begin{aligned} \dot{P}_1^j &= \omega_0 e_{jkl} (P_1^k B_1^l + \varepsilon G^{kl}); \\ \dot{P}_2^j &= \omega_0 e_{jkl} (\beta_{21} P_2^k B_2^l - \varepsilon G^{kl}); \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned} \dot{G}^{jk} &= -\omega_0 (e_{jj'k} B_1^{j'} G^{kk'} + \beta_{21} e_{kj'k'} B_2^{j'} G^{kj}) + \\ &+ \varepsilon \omega_0 e_{jkl} (P_1^l - P_2^l). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Здесь введены обозначения:

$$\omega_0 = \omega_{01}, \beta_{21} = \frac{\omega_{02}}{\omega_{01}}, \varepsilon = \frac{\Omega}{\omega_0}. \quad (5.17)$$

Как видим, уравнения для средних представляют собой связанную систему уравнений для шести компонентов двух векторов дипольных моментов и девяти компонент тензора среднего квадрупольного момента. Таким образом, «для описания двухкубитовых квантовых операций простой векторной модели не существует» [4].

Однако при экспериментальной реализации двухкубитовых операций с использованием конкретных веществ в молекулах этих веществ энергия межядерного взаимодействия во много раз меньше расстояния между энергетическими уровнями отдельных спинов в магнитном поле, которое в частотных единицах, как уже упоминалось выше, составляет  $10^7 \dots 10^8$  Гц. Так, в молекуле хлороформа  $\text{H-}^{13}\text{C}(\text{Cl}_3)$  [4, 9], в которой спин  $\frac{1}{2}$  ядра атома водорода используется в качестве управляющего, а спин  $\frac{1}{2}$  ядра атома углерода-13 – в качестве целевого, константа взаимодействия составляет 215 Гц. В молекуле диметоксифосфина (диметилового эфира фосфоновой кислоты)  $\text{H-PO}(\text{OCH}_3)_2$  [10] для ядер атомов водорода и фосфора эта константа равна 680 Гц. Таким образом, величина  $\varepsilon$  в (5.15)–(5.17) не превышает  $10^{-4}$ , что даёт возможность применить теорию возмущений.

Рассмотрим систему уравнений (5.15)–(5.16) в приближении слабой связи:  $\varepsilon \ll 1$ . Найдем вид этих уравнений в линейном приближении по  $\varepsilon$ .

При  $\varepsilon = 0$ , т.е. в отсутствие взаимодействия, матрица плотности системы имеет вид (5.5). Подстановка этого выражения в выражения (5.9) для средних дипольных моментов даёт:

$$\begin{aligned} \bar{P}_n &= Sp \rho_0 \hat{F}_1 = \frac{1}{2} Sp (I_n + \bar{m}_n \bar{\sigma}_n) \bar{\sigma}_n = \bar{m}_n, \\ n &= 1, 2. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Уравнения (5.15) при этом принимают вид (5.6). Решать уравнения (5.16) нет необходимости, поскольку из (5.5) следует:

$$G^{jk} = m_1^j m_2^k. \quad (5.19)$$

Таким образом, динамика системы полностью описывается уравнениями (5.6).

В первом приближении по  $\varepsilon$ , согласно теории возмущений, в правые части уравнений (5.15) необходимо подставить величину  $G^{kl}$ , найденную в нулевом приближении, т.е. выражение (5.19). Поскольку матрица плотности (5.7) не зависит от  $\varepsilon$ , то в случае справедливости выражения (5.19) для векторов  $\bar{P}_n$  выполняются соотношения (5.18). Подставляя (5.19) в правые части уравнений (5.15), с учетом (5.18), получаем замкнутую систему уравнений для векторов поляризации отдельных спинов, учитывающую их взаимодействие в первом порядке теории возмущений:

$$\begin{aligned} \dot{\bar{m}}_1 &= \omega_0 \bar{m}_1 \times (\bar{B}_1 + \varepsilon \bar{m}_2); \\ \dot{\bar{m}}_2 &= \omega_0 \bar{m}_2 \times (\beta_{21} \bar{B}_2 + \varepsilon \bar{m}_1). \end{aligned} \quad (5.20)$$

В линейном приближении поведение среднего квадрупольного момента описывается выражением (5.19) с учетом динамики векторов спиновых поляризаций в соответствии с уравнениями (5.20). Учитывать слагаемое с  $\varepsilon$  в уравнении (5.16) нужно лишь в следующем порядке теории возмущений, в чём нет необходимости.

На рис. 3 представлены результаты компьютерного моделирования операции CNOT:  $|BA\rangle \rightarrow |BB\rangle$  при использовании упрощенной схемы [4] с помощью численного решения уравнений (5.20).

Два кубита (1-й – управляющий, 2-й – целевой) первоначально находятся в состоянии  $|BA\rangle$ :

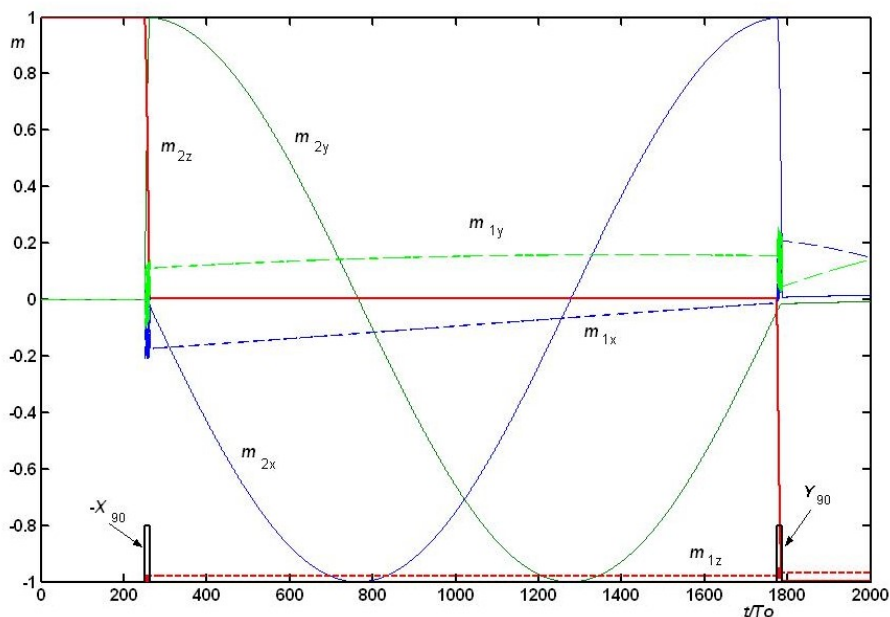
$$\bar{m}_1 = (0, 0, -1), \bar{m}_2 = (0, 0, 1).$$

На систему подаётся 1-й управляющий импульс на частоте  $\omega_{02} = \beta_{21} \omega_0$  длительностью  $\beta_{21} \omega_R \cdot (T_{1e} - T_{1b}) = \pi/2$  с начальной фазой  $\varphi_R(T_{1b}) = 0$  ( $-X_{90}$ -импульс). Через промежуток времени, за который целевой спин повернётся в поле, созданном управляющим спином, вокруг оси Z ВСК на угол  $3\pi/2$ , подаётся второй импульс длительностью  $\beta_{21} \omega_R \cdot (T_{2e} - T_{2b}) = \pi/2$  с фазой  $\varphi_R(T_{2b}) = \pi/2$  ( $Y_{90}$ -импульс). В результате система переходит в состояние

$$\vec{m}_1(T_{2e}) \approx (0, 0, -1), \vec{m}_2(T_{2e}) = (0, 0, -1),$$

которое, очевидно, соответствует квантовому состоянию  $|BB\rangle$ . Заметим, что радиочастотное поле

на резонансной частоте для целевого кубита вызывает незначительные изменения вектора поляризации управляющего кубита, что и отражено на графиках рис. 3.



**Рис. 3.** Графики составляющих векторов спиновой поляризации  $\vec{m}_1, \vec{m}_2$  в ВСК при выполнении операции CNOT:  $\omega_R / \omega_0 = 0.08, \beta_{21} = 0.25, \varepsilon = 0.0005$

Таким образом, разработанная математическая модель адекватно описывает поведение как отдельного кубита, так и двух взаимодействующих кубитов при проведении квантовых логических операций. Полученные уравнения могут служить основой для компьютерного моделирования процессов квантовых вычислений, влияния на них окружения и стабилизации состояний для предотвращения или уменьшения ошибок при квантовых вычислениях

### Список литературы

1. Nazario Z. Errors in the machine // Scientific American Magazine. 2022. Vol. 326. N. 5. P. 28–35.
2. Богданов Ю. И. Физико-статистические основы квантовой информатики. М.: МИЭТ, 2010. 163 с.
3. Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения. М.: Мир, 1983. 248 с.
4. Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2001. 352 с.
5. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. М.: Мир, 1990. 711 с.
6. Оценков А. Ю. Кинетика спиновых систем, взаимодействующих со стохастическим полем решетки: дис. к.ф.-м.н. Пермь: изд-во Пермского ун-та, 1987. 182 с.

7. Оценков А. Ю. Исследование механизмов релаксации намагниченности в мезоскопических парамагнетиках с помощью компьютерного моделирования // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2012. Вып. 1 (19). С. 54–60.
8. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1984. 832 с.
9. Фельдман Э. Б. Квантовые технологии. Лекция 2. «Физические основы квантовых вычислений и принципы квантовых компьютеров на основе ядерного магнитного резонанса» (Электронный ресурс). URL: [https://youtu.be/c\\_5EP59xOfY](https://youtu.be/c_5EP59xOfY) (дата обращения: 20.02.2024)
10. Волков М. Ю. Реализация квантовых вычислений с использованием спинов электронов и ядер в качестве элементной базы: автореф. дис. к.ф.-м.н., Казань: КФТИ, 2012. 23 с.

### References

1. Nazario Z. Errors in the machine. *Scientific American Magazine*, 2022, vol. 326, no. 5, pp. 28–35.
2. Bogdanov Yu. I. *Fiziko-statisticheskie osnovy kvantovoi informatiki* [Physico-statistical Foundations of Quantum Information Science]. Moscow: MIET, 2010. 163 p. (In Russian).

3. Blum K. *Density Matrix Theory and Applications*. New York and London: Plenum Press, 1981. 248 p.
4. Valiev K. A., Kokin A. A. *Kvantovye komp'utery: nadezhdy i real'nost'* [Quantum Computers: Hopes and Reality]. Izhevsk: Reguliarnaiia i khaoticheskaia dinamika, 2001. 352 p. (In Russian).
5. Ernst R., Bodenhausen G., Wokaun A. *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*. Oxford: Oxford University Press, 1987. 711 p.
6. Oshchepkov A. Yu. *Kinetika spinovykh sistem, vzaimodeistvuiushchikh so stokhasticheskim polem reshetki* [Kinetics of spin systems interacting with a stochastic field of lattice]. Cand. phys. and math. sci. thesis. Perm: Perm State University, 1987. 182 p. (In Russian).
7. Oshchepkov A. Yu. Research of relaxation mechanisms of magnetization in mesoscopic paramagnets by means of computer simulation. *Bulletin of Perm University. Series: Physics*, 2012, no. 1, pp. 54–60. (In Russian).
8. Korn G. A., Korn T. M. *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers*. McGraw Hill Book Company, 1968. 832 p.
9. Feldman E. B. *Fizicheskie osnovy kvantovykh vychislenii i printsipy kvantovykh komp'uterov na osnove iadernogo magnitnogo rezonansa* [Physical foundations of quantum computing and principles of quantum computers based on nuclear magnetic resonance] (Electronic resource). URL: [https://youtu.be/c\\_5EP59xOfY](https://youtu.be/c_5EP59xOfY) (In Russian) (Access date: 20.02.2024).
10. Volkov M. Yu. *Realizatsiia kvantovykh vychislenii s ispolzovaniem spinov elektronov i iader v kachestve elementnoi bazy* [Implementation of quantum computing using spins of electrons and nuclei as an elemental base]. Abstr. of Cand. of phys. and math. sci. thesis. Kazan: Zavoisky Physical-Technical Institute, 2012. 23 p. (In Russian).

**Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:**

Ощепков А. Ю. Эволюционные уравнения для исследования динамики кубитов в переменных магнитных полях // Вестник Пермского университета. Физика. 2024. № 2. С. 5–18. doi: 10.17072/1994-3598-2024-2-05-18

**Please cite this article in English as:**

Oshchepkov A. Yu. Evolutionary equations for studying the dynamics of qubits in variable magnetic fields. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2024, no. 2, pp. 5–18. doi: 10.17072/1994-3598-2024-2-05-18

**Сведения об авторах**

Александр Юрьевич Ощепков, канд. физ.-мат. наук, профессор кафедры радиоэлектроники и защиты информации, Пермский государственный национальный исследовательский университет, ул. Букирева, 15, Пермь, 614068

**Author information**

Alexander Yu. Oshchepkov, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor in the Department of Radio Electronics and Information Security, Perm State University; 15, Bukireva st., Perm, 614068, Russia