ЖЭТФ, 2014, том 146, вып. 5 (11), стр. 933–945

КВАНТОВЫЕ И КЛАССИЧЕСКИЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ЭЛЕКТРОННО-ЯДЕРНОМ СПИНОВОМ ЭХЕ

В. Е. Зобов *

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

Поступила в редакцию 5 июня 2014 г.

Исследованы квантовые свойства динамических корреляций системы из электронного спина в окружении ядерных спинов в условиях наблюдения спада свободной прецессии (ССП) и электронного спинового эха. Получены аналитические результаты, описывающие эволюцию во времени взаимной информации, классической части корреляций и квантовой части, характеризуемой квантовым дискордом, для модели центрального спина в высокотемпературном приближении. Одни и те же формулы описывают дискорд в ССП и в спиновом эхе, хотя вид самих зависимостей от времени и величины магнитного поля различен вследствие различия входящих в формулы параметров. Рассчитаны изменения величины дискорда при наличии ядерной поляризации β_I в дополнение к электронной поляризации β_S. Показано, что метод редукции матрицы плотности к двухспиновой электронно-ядерной системе качественно правильно описывает парные корреляции, играющие главную роль при $\beta_S \approx \beta_I$ на малых временах. На больших временах такие корреляции затухают и главная роль переходит к многоспиновым корреляциям, обеспечивающим отличные от нуля значения взаимной информации и квантового дискорда.

DOI: 10.7868/S0044451014110054

1. ВВЕДЕНИЕ

Открытое Ханом спиновое эхо [1] послужило основой многих направлений применения магнитного резонанса: с одной стороны, как метода изучения локальных свойств твердых тел и жидкостей [2, 3], с другой стороны, в качестве реализуемого примера эха Лошмидта при изучении неравновесных процессов в многоспиновых системах [4, 5]. В последнее время возрос интерес к изучению квантовой информации [6–9], прежде всего, благодаря ее свойствам, обещающим принципиально новые возможности в быстродействии квантового компьютера, для развития связи и метрологии. Из-за технических сложностей пока еще не построены реальные устройства, реализующие эти возможности на многочастичных квантовых системах. Однако физические свойства квантовой информации можно изучать на таких системах традиционными методами, в том числе и методом спинового эха. Практически важной и хорошо изученной этим методом является система из электронного спина в окружении ядерных спинов. В качестве примера приведем теоретические работы [10–14], в которых можно найти ссылки на используемые методы, полученные результаты и их анализ. Такая система представляется перспективной и для реализации устройств обработки квантовой информации [15].

Система из электронного спина в окружении ядерных спинов близка по устройству к квантовым системам, применяемым для реализации модели детерминистического квантового вычисления с одним поляризованным кубитом, взаимодействующим с системой кубитов в смешанном состоянии, (DQC1) [16]. Известно, что, согласно теории, компьютер DQC1-модели может решать некоторые задачи, сводящиеся к вычислению следа матрицы, быстрее классического компьютера [16–23]. Работа такого компьютера продемонстрирована в экспериментах на простых системах: например, молекулы в растворе, управляемые методом ЯМР [18, 20, 23], примеси Ce^{3+} в кристалле CaF_2, наблюдаемые методом ЭПР [24]. Предполагается, что важную роль в быстродействии DQC1-модели играют квантовые корреляции. Наиболее популярной мерой квантовых корреляций при высоких температурах считается квантовый дискорд (discord) [9]. С целью вы-

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

яснения роли квантовых корреляций в ряде работ [17, 19, 21–23] выполнена оценка квантового дискорда при работе DQC1-компьютера. Однако однозначного вывода пока не сделано [19, 21–23, 25] и динамика таких систем нуждается в дальнейших исследованиях.

В настоящей работе рассмотрим эволюцию во времени квантового дискорда в условиях наблюдения электронного спинового эха и спада свободной прецессии (ССП) в системе из электрона и окружающих его ядер. Покажем сходство динамики такой системы с динамикой DQC1-модели. Различия между системами заключены в способах управления: в случае DQC1-модели каждым ядерным спином необходимо управлять индивидуально с целью реализации квантового алгоритма, тогда как при наблюдении спинового эха эволюция ядерных спинов обусловлена внутренними взаимодействиями и внешним магнитным полем. Несмотря на большое число работ, посвященных расчетам дискорда в разных системах, нам неизвестны работы по расчету дискорда в условиях спинового эха. Отметим несколько близких работ. В работе [26] был выполнен расчет зависимости дискорда от времени и температуры для двух спинов $S = 1/2$ в условиях наблюдения многоквантовой когерентности, а в работе [27] — в условиях наблюдения ССП спина примеси, взаимодействующего с цепочкой ядерных спинов. В работе [28] в высокотемпературном приближении рассчитана эволюция квантовых корреляций двух больших спинов ($S > 1/2$) в условиях наблюдения ССП. Наконец, в работе [29] авторы на примеси фосфора в твердом кремнии экспериментально подготовили специальное состояние (состояние Белла) ансамбля двухспиновых систем электрон–ядро с отличным от нуля дискордом и наблюдали его уменьшение под действием окружающих спинов ядер ^{29}Si, рассматриваемых как случайное поле (шум).

О квантовых эффектах ведется речь во многих работах по спиновому эху. Например, в работах [30, 31] авторы связывают изменение затухания спинового эха электронного спина NV-центра в алмазе при увеличении магнитного поля с ослаблением квантовых флуктуаций. Они полагают, что если в основе затухания эха лежат изменения состояний ядер, обусловленные переворотом электронного спина (back action), то действие системы ядер следует считать квантовым (квантовый резервуар) [30–32]. Наоборот, если изменения состояний ядер, приводящие к затуханию эха, происходят независимо от состояния электронного спина, то такой резервуар считают классическим. Для сравнения двух характеристик квантовости мы рассчитаем квантовый дискорд в тех же условиях.

Статья имеет следующую структуру. В разд. 2 получены аналитические результаты, описывающие эволюцию во времени квантового дискорда спинового эха и ССП для модели центрального спина в высокотемпературном приближении, при учете только поляризации электронного спина. Обсуждается зависимость дискорда от числа ядер, величины магнитного поля, а также его связь с характеристикой квантовости резервуара ядер, определяемой по свойству «back action». В разд. 3 дополнительно учтен вклад от поляризации ядерных спинов и проанализированы связанные с этим изменения во временной зависимости дискорда. Расчет выполнен для полной матрицы плотности и матрицы, редуцированной к паре спинов. Результаты двух подходов сравниваются. В Заключении сделаны общие выводы о динамике рассматриваемой системы. В Приложениях A, B, C приведены детали расчетов.

2. КВАНТОВЫЙ ДИСКОРД В МОДЕЛИ ЦЕНТРАЛЬНОГО СПИНА

2.1. Теория

Рассмотрим систему из электронного спина и n ядерных спинов в сильном постоянном магнитном поле с гамильтонианом [10–14, 24, 29–31]

$$\hat{H} = \omega_e \hat{S}_z - \sum_j \omega_j \hat{I}_{jz} + \hat{S}_z \sum_j A_{jz} \hat{I}_{jz} + \\ + \hat{S}_z \sum_j A_{jy} \hat{I}_{jy} + \hat{S}_z \sum_j A_{jx} \hat{I}_{jx} + \hat{H}_{II}, \quad (1)$$

где ω_e, ω_j — ларморовские частоты электронного $S = 1/2$ и ядерных $I = 1/2$ спинов, взята система единиц при $\hbar = 1$, $\hat{I}_{j\alpha}$ — α-компонента оператора спина j ($\alpha = x, y, z$), $A_{j\alpha}$ — константа сверхтонкого взаимодействия, $\hat{H}_{II}$ — диполь-дипольные взаимодействия ядерных спинов.

Для электронных спинов в сильном постоянном магнитном поле при комнатной температуре T поляризация мала: $\beta_S = \omega_e/kT \sim 10^{-3} \ll 1$, а для ядерных спинов β_I еще в тысячу раз меньше, поэтому равновесную матрицу плотности возьмем сначала в следующем виде [24, 29, 33, 34]:

$$\hat{\rho}_{eq} = \left(1 - \beta_S \hat{S}_z\right)/Z, \quad (2)$$

где $Z = 2^{n+1}$ — статистическая сумма. Влияние ядерной поляризации будет рассмотрено в следующем разделе. Далее будем проводить вычисления в системе координат, вращающейся с частотой ω_e (ВСК), в которой в (1) исчезнет первый зеемановский член. Подействуем на систему импульсом магнитного поля сверхвысокой частоты (СВЧ), вызывающим поворот электронного спина на угол 90° вокруг оси y ВСК. После импульса будет наблюдаться сигнал ССП в плоскости xy, $g_f(t)$. Если по прошествии времени t подействовать на систему вторым СВЧ-импульсом, поворачивающим электронный спин на угол 180° вокруг оси x ВСК, то в момент времени $2t$ будет наблюдаться спиновое эхо с амплитудой $g_e(t)$. Матрица плотности, описывающая эволюцию состояния системы, может быть записана в обоих случаях в виде

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{Z}\left[1 - \frac{\beta_S}{2}\left\{\hat{S}_+\hat{U}^+_{(f,e)}(t) + \hat{S}_-\hat{U}^-_{(f,e)}(t)\right\}\right] = \frac{1}{Z}\left[1 - \beta_S\Delta\hat{\rho}_{SI}(t)\right], \quad (3)$$

где $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$,

$$\begin{aligned} \hat{U}^+_f(t) &= \exp\left(-it\hat{H}_+\right)\exp\left(it\hat{H}_-\right), \\ \hat{U}^+_e(t) &= \exp\left(-it\hat{H}_+\right)\exp\left(-it\hat{H}_-\right) \times \\ &\times \exp\left(it\hat{H}_+\right)\exp\left(it\hat{H}_-\right), \end{aligned} \quad (4)$$

$\hat{H}_+$ и $\hat{H}_-$ — значения гамильтониана (1) при фиксированных значениях проекции электронного спина соответственно $S_z = +1/2$ и $S_z = -1/2$, $\hat{U}^-_{(f,e)}$ — оператор, эрмитово сопряженный $\hat{U}^+_{(f,e)}$. Подобные преобразования операторов эволюции (4) часто используются при описании спинового эха в электронно-ядерных системах. Детали можно найти в Приложении А. Для сигнала ССП или амплитуды эха получаем из (3)

$$g_{(f,e)}(t) = \frac{\langle\hat{S}_x(t)\rangle}{\langle\hat{S}_x(0)\rangle} = \frac{\mathrm{Tr}\{\hat{S}_x\hat{S}_x(t)\}}{\mathrm{Tr}\,\hat{S}_x^2} = \mathrm{Re}\,\mathrm{Tr}\left(\hat{U}^+_{(f,e)}(t)\right),$$

где $\langle\hat{S}_x(t)\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{S}_x\rho(t)\}$ — среднее значение проекции спинового момента на ось x.

Матрица плотности (3) имеет тот же вид, что и матрица квантового вычисления в DQC1-модели [16, 17]. В последнем случае вместо унитарных операторов (4) готовят унитарный оператор $\hat{U}^+_n$, след которого требуется вычислить для решения задачи. Действительную или мнимую часть искомого следа находят посредством измерения средних проекций соответственно по осям x $\langle\hat{S}_x\rangle$ или y $\langle\hat{S}_y\rangle$. Близость систем позволяет в анализе квантовых корреляций нашего состояния (3) следовать подходу, разработанному в работах [17, 19, 21–23] для DQC1-модели.

Мерой корреляции между двумя системами служит взаимная информация [8, 9]:

$$I(\hat{\rho}) = S(\hat{\rho}_S) + S(\hat{\rho}_I) - S(\hat{\rho}), \quad (5)$$

где $S(\hat{\rho}) = -\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\log_2\hat{\rho}\}$ — энтропия фон Неймана, $\hat{\rho}_S = \mathrm{Tr}_I\,\hat{\rho}$, $\hat{\rho}_I = \mathrm{Tr}_S\,\hat{\rho}$ — редуцированные матрицы плотности, получаемые после вычисления следа матрицы (3) по состояниям соответственно ядерных спинов или электронного спина. Классические корреляции будем определять через взаимную информацию $I(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho}))$ состояния после проективного измерения фон Неймана электронного спина [9, 17, 19]. В случае системы с $S = 1/2$ полный набор взаимно ортогональных проекторов состоит из двух проекторов общего вида [9, 17]:

$$\hat{\Pi}_{S\pm} = \frac{1}{2} \pm \left(a_x\hat{S}_x + a_y\hat{S}_y + a_z\hat{S}_z\right), \quad (6)$$

где a_α — направляющие косинусы, $\alpha = x, y, z$. Меру классических корреляций получаем после нахождения максимума по направлениям измерения. Для нашего состояния (3), следуя работе [17], будем брать $a_z = 0$, $a_x = \cos\varphi$, $a_y = \sin\varphi$. Квантовый дискорд определяется как разность этих двух величин [9, 17, 19]:

$$D = I(\hat{\rho}) - \max_{a_\alpha} I\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho})\right). \quad (7)$$

В случае DQC1-модели в работе [17] показано, что для достаточно сложной системы с широким спектром собственных значений оператора U^+_n дискорд достигает некоторой величины, которая перестает зависеть от числа кубитов (ядер) n и принимает в нашем высокотемпературном пределе значение (см. Приложение С)

$$D \approx \frac{\beta_S^2}{16\ln 2}. \quad (8)$$

В работах [19, 21, 22] для DQC1 показано, что дискорд, определенный после измерения второй (ядерной) подсистемы, равен нулю. Достаточно в качестве базиса, на который проводится проецирование состояния $\hat{\rho}(t)$, взять собственные состояния операторов $\hat{U}^\pm_n$ ($\hat{U}^\pm_{(f,e)}$ в нашем случае).

Отметим, что рассчитанное с помощью ортогональных измерений (6) значение дискорда служит верхней границей для дискорда, определенного при использовании обобщенных неортогональных

POVM-измерений (positive-operator-valued measurement) [9, 19, 22, 35]. В случае измерений на двухуровневой системе различия этих значений дискорда очень малы (см., например, [35]). В первую очередь нас интересует качественный анализ свойств динамических квантовых корреляций, поэтому, следуя работам [17, 19–22, 27], будем применять более простое ортогональное измерение.

Для получения возможности дальнейшего, более детального анализа упростим модель (1), положив $A_{jz} = A_{jy} = 0$ и $H_{II} = 0$. В этом случае находим (см. Приложение A)

$$\hat{U}^{\pm}_{(f,e)}(t) = = \prod_j \left\{ U^{(f,e)}_{j0}(t) \pm i I_{jx} U^{(f,e)}_{jx}(t) \pm i I_{jy} U^{(f,e)}_{jy}(t) \right\}. \quad (9)$$

Входящие функции приведем отдельно для ССП и спинового эха, опустив для упрощения записи индекс j:

$$\begin{gathered} U^f_0(t) = 1 - 2n_x^2 \sin^2 \frac{t\Omega}{2}, \\ -U^f_x(t) = F_x = 2n_x \sin(t\Omega), \\ -U^f_y(t) = F_y = 4n_x n_z \sin^2 \frac{t\Omega}{2}, \\ U^e_0(t) = 1 - \frac{1}{2} F_y^2, \quad U^e_x(t) = -F_x F_y \frac{n_z}{n_x}, \\ U^e_y(t) = 2F_y \left(1 - F_y \frac{n_z}{2n_x} \right), \end{gathered} \quad (10)$$

где

$$\Omega^2 = \omega^2 + \frac{A_x^2}{4}, \quad n_x = \frac{A_x}{2\Omega}, \quad n_z = \frac{\omega}{\Omega}.$$

В этой модели для сигнала ССП или амплитуды эха получаем

$$g_{(f,e)}(t) = \prod_j U^{(f,e)}_{j0}(t). \quad (11)$$

Подставив эти функции (опустив теперь индекс (f,e)) в общие формулы (5) и (7) и ограничившись первым неисчезающим членом разложения по β_S, находим (см. Приложение B)

$$I(\rho) = \frac{\beta_S^2}{8 \ln 2} \left[1 - g^2(t) \right], \quad (12)$$

$$\max_\varphi I\left(\hat{\Pi}_S\left(\hat{\rho} \right) \right) = = \max_\varphi \left\{ \frac{\beta_S^2}{16 \ln 2} \left[1 - g^2(t) - K \cos(2\varphi) \right] \right\}, \quad (13)$$

где

$$K = \prod_j U^2_{j0}(t) - \prod_j \left[2U^2_{j0}(t) - 1 \right]. \quad (14)$$

Максимум в (13) достигается при $\varphi = 0$, если $K < 0$, и при $\varphi = \pi/2$, если $K > 0$. Отсюда для дискорда (7) имеем

$$D = \frac{\beta_S^2}{16 \ln 2} \left[1 - g^2(t) - |K| \right], \quad (15)$$

$$\frac{D}{I(\rho)} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{|K|}{1 - g^2(t)} \right]. \quad (16)$$

Оценку (8) получаем из (15) в том случае, когда все входящие произведения по j равны нулю. Такое может случиться на достаточно больших временах при достаточно большом числе ядер. В этом случае $K = 0$ и исчезает зависимость от угла φ в (13).

В завершение раздела заметим, что поскольку взаимная информация и дискорд не изменяются при унитарном преобразовании одной из двух подсистем [9], формулы (9)–(16) описывают системы с гамильтонианами, полученными из (1) преобразованием поворота ядерных спиновых компонент. Например, если $A_{jx} = A_{jy} = 0$, но $A_{jz} \neq 0$, и ядерное зеемановское взаимодействие имеет вид $\sum_j \omega_j \hat{I}_{jx}$. Таким сверхтонким взаимодействием описывают, в частности, примеси фосфора в кремнии [11, 29].

2.2. Обсуждение

Для изучения зависимости (12), (15) и (16) от параметров рассмотрим однородный случай равного значения констант $A_{jx} = A$ и ларморовских частот $\omega_j = \omega$ для n ядер. Тогда

$$g(t) = U_0^n(t), \quad K = U_0^{2n}(t) - \left[2U_0^2(t) - 1 \right]^n. \quad (17)$$

В этом случае при четном n

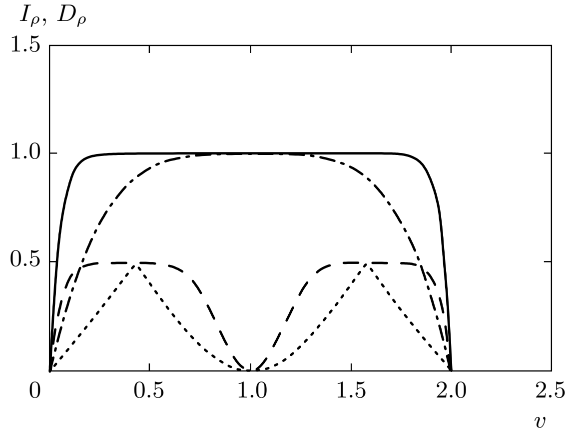
$$\begin{aligned} K \geq 0 \quad &\text{при} \quad 1/3 \leq U_0^2(t) \leq 1, \\ K \leq 0 \quad &\text{при} \quad 0 \leq U_0^2(t) \leq 1/3. \end{aligned}$$

При нечетном n величина $K \geq 0$ при любом возможном значении $U_0^2(t)$. И в том, и в другом вариантах при $U_0^2(t) = 1/3$ дискорд достигает наибольшего значения

$$D = \frac{\beta_S^2}{16 \ln 2} [1 - 3^{-m}], \quad (18)$$

где $m = n$ при четном n и $m = n - 1$ при нечетном n. При этом в обоих вариантах

$$I(\rho) = \frac{\beta_S^2}{8 \ln 2} [1 - 3^{-n}]. \quad (19)$$



Зависимости от параметра v (20) при разных числах ядер n взаимной информации $I_\rho = I(\rho) \cdot 8 \ln 2/\beta_S^2$ при $n = 10$ (сплошная линия), 2 (штрихпунктирная) и относительной доли квантового дискорда $D_\rho = D/I(\rho)$ при $n = 10$ (штриховая линия), 2 (пунктирная)

Запишем функцию $U_0^2(t)$ в виде $U_0^2(t) = (1-v)^2$, где согласно (10)

$$\begin{aligned} &\text{для ССП} \quad v = 2n_x^2 \sin^2 \frac{t\Omega}{2}, \\ &\text{для эха} \quad v = 8n_x^2 n_z^2 \sin^4 \frac{t\Omega}{2}. \end{aligned} \tag{20}$$

В обоих случаях параметр v периодически изменяется во времени. Амплитуда этих осцилляций зависит от магнитного поля по-разному. При увеличении поля эта амплитуда для ССП уменьшается от 2 до 0, тогда как для эха она сначала возрастает от 0 при $\omega = 0$ до максимального значения 2 при $\omega = A/2$, а затем стремится к 0 при $\omega \to \infty$. Зависимости взаимной информации (12) и дискорда (16) от параметра v (20) приведена на рисунке. Они задаются одними и теми же функциями от v как для ССП, так и для спинового эха.

При $v = 0$, например в начальный момент времени, $U_0^2(t) = 1$ и $D = 0$. Рассмотрим случай, когда величина $U_0^2(t)$ близка к единице. При $vn \ll 1$ находим, что

$$\frac{D}{I(\rho)} \approx v(n-1). \tag{21}$$

Если же $v \ll 1$, но $vn > 1$, то можно вывести из формул (12), (16) и (17) выражение для оценок

$$\frac{D}{I(\rho)} \approx \frac{1}{2} \left[1 - \exp(-2vn)\right], \tag{22}$$

описывающее возрастание дискорда до максимального значения (8) при достаточно большом числе ядер.

При дальнейшем увеличении времени до значения $t\Omega/2 = \pi$ получаем снова $v = 0$ и $D = 0$. При недостаточном числе n ядер, условия для которого получаем из (20):

$$\begin{aligned} &\text{для ССП} \quad n < 1/(2n_x^2), \\ &\text{для эха} \quad n < 1/(8n_x^2 n_z^2), \end{aligned} \tag{23}$$

дискорд D будет периодически достигать значения, меньшего, чем (8). С другой стороны, при ограниченном числе ядер неравенства (23) можно рассматривать как условия для величины магнитного поля. При увеличении поля сверх граничного значения, определенного неравенствами (23) вследствие $n_x \to 0$, достижимое значение дискорда уменьшается (для эха уменьшение произойдет и в другом пределе — пределе малых полей вследствие $n_z \to 0$).

При определенных условиях, которые можно вывести из (20), $v = 1$ и, следовательно, $U_0^2(t) = (1-v)^2 = 0$. В этом случае, согласно (17), $g(t) = 0$, а $|K| = 1$, поэтому взаимная информация $I(\rho)$ максимальна, тогда как $D = 0$.

Для физического объяснения этих свойств обратимся к матрице плотности (3). Мнимая часть оператора $\hat{U}^+_{(f,e)}$, согласно (9), содержит произведение нечетного числа операторов $\hat{I}_{jx}$ и $\hat{I}_{jy}$, тогда как действительная часть содержит произведение четного их числа. Следовательно, слагаемые с операторами электронного спина $\hat{S}_y$ и $\hat{S}_x$ ответственны за разные корреляции. При проецировании матрицы плотности (3) на одно направление при измерении (6) квантовая часть корреляций теряется. Исключение составляет случай одного ядра $n = 1$, при котором все корреляции сосредоточены в члене одного направления $\hat{S}_y$. Поэтому при проецировании на это направление не происходит потерь корреляций и квантовый дискорд равен нулю (с рассматриваемой нами точностью до членов β_S^2, тогда как члены более высокой степени отличны от нуля, что можно заключить из общего решения для двухкубитовой модели DQC1 [23]). Член одного направления ($\hat{S}_x$ при четном n и $\hat{S}_y$ при нечетном n) остается в выражении (3) с операторами (9) при выполнении условия $U_0^2(t) = 0$. При $vn \ll 1$ у корреляций сохраняется выделенное направление y ($\hat{S}_y$), поэтому дискорд (21) мал.

Наконец, при $v \ll 1$, но $vn > 1$ дискорд (22) стремится к максимальному значению. Проанализируем структуру этого состояния, используя представление (C.3) Приложения C для матрицы плотности в базисе собственных функций $|\Theta_k\rangle$ операторов эволюции (4). Это смешанное состояние представлено в виде суперпозиции состояний с определенными значениями оператора эволюции, которые, в свою очередь, определяются состояниями электронного и ядерных спинов. Каждому такому состоянию соответствует своя определенная ориентация вектора электронного спина $\langle \mathbf{S}\rangle_k$ в плоскости xy. Условие $vn > 1$ при $v \ll 1$ приводит к тому, что векторы $\langle \mathbf{S}\rangle_k$ равномерно распределяются по всем направлениям. В этом случае в формуле (C.6)

$$2^{-n}\sum_k \cos^2(\varphi+\Theta_k) \approx 1/2, \tag{24}$$

а $\tau_{Re} \approx \tau_{Im} \approx 0$. Спиновые операторы разных направлений не коммутируют между собой, поэтому не могут быть измерены одновременно. Если выполнено соотношение (24), то при проецировании (6) на любое направление теряем половину корреляций и квантовый дискорд достигает максимального значения в согласии с формулой (22). При этом, поскольку рассматриваемые состояния являются сепарабельными состояниями, отсутствует квантовая запутанность, характеризующая квантовые корреляции другого сорта [6–9, 17, 19, 21–23]. Выполненное исследование работы DQC1-компьютера показало, что запутанность появляется при низких температурах, когда $\beta_S > 1$ [17]. В этих условиях неприменимо высокотемпературное приближение.

Вернемся к случаю разных констант сверхтонкого взаимодействия (11)–(16). При малых значениях параметров v_j в формулах (21) и (22) следует заменить vn на $\sum_j v_j$. При увеличении значений этих параметров условия $v_j = 1$ будут выполняться для разных ядер в разные моменты времени, поэтому не будет общей точки $v = 1$ и при достаточно большом числе ядер не будет минимума дискорда в ней, наблюдавшегося на рисунке. Более-менее равномерное распределение электронных спинов в плоскости xy, раз возникнув, будет сохраняться в дальнейшем, поэтому после достижения максимального значения дискорд сохранит это значение на больших временах.

Измерение корреляций можно выполнить без потерь, если воспользоваться процедурой «отпирания» (unlocking) классических корреляций, предложенной в работе [36]. С этой целью сначала следует выполнить проективное измерение ядерной системы в базисе собственных функций $|\Theta_k\rangle\langle\Theta_k|$ оператора эволюции (см. Приложение C). Использование этой информации при измерении спина S позволяет выбрать правильное направление $\varphi_k = -\Theta_k$ в проекторе (6). Для получения полной информации измерение следует выполнить для каждого значения Θ_k, т. е. для каждого элемента ансамбля систем в разных классических состояниях. После этого на классическом компьютере могут быть вычислены следы матриц и взаимная информация. Теперь в формуле (C.6)

$$2^{-n}\sum_k \cos^2(\varphi+\Theta_k) = 1$$

вместо 1/2 в (24). Тем самым при таком измерении мы извлекаем всю информацию. Обратим внимание, что при измерении $\langle \hat{S}_x\rangle$ или $\langle \hat{S}_y\rangle$ в квантовой системе мы находим след матрицы эволюции за одно измерение. Здесь на спине S происходит суммирование квантовой информации, неизвестной наблюдателю. При суммировании известной наблюдателю классической информации приходится выполнять $N = 2^n$ операций суммирования матричных элементов на классическом компьютере.

Понятно, что сделанный анализ относится не только к конкретным условиям спинового эха, но и к другим квантовым системам, в том числе к модели DQC1. Если мы будем выполнять эту модель на классической системе (на классическом компьютере), то понадобится ансамбль из $N = 2^n$ классических систем. На каждом элементе ансамбля мы выполним одну операцию U_{ii}, $i = 1, \ldots, N$. Затем последовательно будем суммировать эти результаты: $\sum_{i=1}^N U_{ii}$. В случае реализации на квантовой системе (на квантовом компьютере DQC1) мы готовим квантовую суперпозицию $N = 2^n$ состояний и действуем на все состояния параллельно оператором $\hat{U}_n$. Результаты суммируем на спине S «не читая», а измеряем только конечный результат. Тем самым, преимущество квантового компьютера DQC1 над классическим компьютером, возможно, обусловлено указанным свойством квантовой информации в суперпозиционном состоянии. Это свойство квантовой системы (квантовой информации) характеризует квантовый дискорд, равный по величине, как показано в работе [37], запертой (locking) классической корреляции. Впрочем, связь неоднозначна, поскольку быстрые квантовые вычисления могут происходить и при равном нулю дискорде [21].

Наконец, как было отмечено во Введении, в качестве характеристики квантовости резервуара ядерных спинов, окружающих электронный спин, используют способность изменения состояния резервуара вслед за изменением состояния электронного спина (back action). Такое изменение ведет к неполному восстановлению эха, к затуханию его амплитуды $g_{(e)}(t)$. В результате возникают корреляции между электронным и ядерными спинами, которые характеризуются взаимной информацией (12), выраженной через квадрат амплитуды эха. Описанные в работе [30] особенности временной и полевой зависимостей $g_{(e)}(t)$ проявятся и на величине взаимной информации, которую принято считать [8, 9] мерой полных корреляций. Величину квантовой части корреляций характеризуем дискордом, поведение которого проанализировано выше (см. рисунок). В частности, уменьшение отношения (21) при уменьшении параметра v (20) можно считать в некоторой степени подтверждением вывода авторов работы [30] об уменьшении квантовости при увеличении магнитного поля, хотя при этом уменьшается и полная величина корреляций. Следует обратить внимание на то, что в указанной работе были рассмотрены двухквантовые переходы между уровнями со спиновыми числами $+1$ и -1 спина $S = 1$ NV-центра в алмазе. После замены A_{jx} на $2A_{jx}$ формулы, полученные выше для $S = 1/2$, могут быть распространены на этот переход вместе со сделанными выше по ним качественными выводами о поведении квантовых корреляций. Однако для количественных расчетов они непосредственно неприменимы, поскольку для электронного спина NV-центра нарушаются условия высокотемпературного приближения.

3. УЧЕТ ПОЛЯРИЗАЦИИ ЯДЕРНЫХ СПИНОВ

В настоящем разделе исследуем, как повлияет на величину дискорда учет поляризации ядерных спинов. С этой целью добавим к равновесной матрице плотности (2) слагаемое

$$\beta_I \Delta\hat{\rho}_{IS}/Z = \beta_I \sum_j \hat{I}_{jz}/Z.$$

Эволюция этой части в тех же условиях, что и (3)–(10), может быть записана в виде

$$\Delta\hat{\rho}_{IS}(t) = \sum_j \left\{ U_{j0}^{(f,e)}(t)\hat{I}_{jz} + \right. \\ \left. + \hat{S}_z \hat{I}_{jy} U_{jx}^{(f,e)}(t) + \hat{S}_z \hat{I}_{jx} U_{jy}^{(f,e)}(t) \right\}. \quad (25)$$

Тем самым в результате эволюции рассматриваемая многоспиновая система переходит в состояние

$$\rho(t) = \left\{1 - \beta_S \Delta\hat{\rho}_{SI}(t) + \beta_I \Delta\hat{\rho}_{IS}(t)\right\}/Z. \quad (26)$$

Для этого состояния находим (см. Приложение В) взаимную информацию (5)

$$I(\rho) = \frac{1}{8\ln 2} \times \\ \times \left[\beta_S^2 \left(1 - \prod_j U_{j0}^2(t)\right) + \beta_I^2 \sum_j (1 - U_{j0}^2)\right], \quad (27)$$

и взаимную информацию состояния после измерения фон Неймана с проекторами (6), у которых мы взяли $a_z = \cos\theta$, $a_x = \sin\theta\cos\varphi$, $a_y = \sin\theta\sin\varphi$:

$$I\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho})\right) = \frac{1}{16\ln 2} \times \\ \times \left\{\beta_S^2 \sin^2\theta \left[1 - \prod_j U_{j0}^2(t) - K\cos(2\varphi)\right] + \right. \\ + 2\beta_I^2 \cos^2\theta \sum_j \left(1 - U_{j0}^2\right) + 2\beta_I\beta_S \sin\varphi \sin\theta\cos\theta \times \\ \left. \times \sum_j (U_{jx}(t)U_{jy}(t)) \prod_{k(\neq j)} U_{k0}(t) \right\}. \quad (28)$$

Исследуем выражение (28) на малых временах, когда $U_{j0}^2(t)$ близко к единице и имеет вид $U_{j0}^2(t) = (1 - v_j)^2$, где $v_j \ll 1$ определено в (20). В этом случае можно пренебречь перекрестным членом, поскольку согласно (10)

$$|U_{jx}(t)U_{jy}(t)| < 1 - U_{j0}^2(t) \approx 2v_j.$$

Тогда

$$I\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho})\right) \cdot 8\ln 2 = \\ = \left[\beta_S^2(1 - \cos(2\varphi))\sin^2\theta + \beta_I^2\cos^2\theta\right] \sum_j v_j. \quad (29)$$

В этом же приближении

$$I(\hat{\rho}) = \frac{\beta_S^2 + \beta_I^2}{4\ln 2} \sum_j v_j. \quad (30)$$

Максимального значения функция (29) достигает при $\varphi = \pi/2$. В этом случае получаем

$$I\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho})\right) \cdot 4\ln 2 = \left[\beta_S^2 \sin^2\theta + \beta_I^2\cos^2\theta\right] \sum_j v_j.$$

Максимальное значение последнего выражения достигается при $\theta = \pi/2$, если $\beta_S^2 > \beta_I^2$, и при $\theta = 0$, если $\beta_S^2 < \beta_I^2$. На этом основании для дискорда (7) получаем

$$D = \\ = \begin{cases} \dfrac{\beta_I^2}{4\ln 2}\displaystyle\sum_j v_j = I(\rho)\dfrac{\beta_I^2}{\beta_S^2+\beta_I^2} \text{ при } \beta_S^2 > \beta_I^2, \\ \dfrac{\beta_S^2}{4\ln 2}\displaystyle\sum_j v_j = I(\rho)\dfrac{\beta_S^2}{\beta_S^2+\beta_I^2} \text{ при } \beta_S^2 < \beta_I^2. \end{cases} \tag{31}$$

Отметим, что при очень малых значениях β_I^2 следует учитывать разложение до высших степеней времени, приводящее к вкладу (21).

В других условиях, на достаточно больших временах при достаточно большом числе ядер, когда в формулах (27) и (28) все входящие произведения по j можно приближенно приравнять к нулю, величина $K = 0$ и исчезает зависимость от угла φ в (28):

$$I\left(\hat{\Pi}_S\left(\hat{\rho}\right)\right) = \frac{1}{16\ln 2} \times \\ \times \left\{\beta_S^2 \sin^2\theta + 2\beta_I^2\cos^2\theta \sum_j (1 - U_{j0}^2)\right\}. \tag{32}$$

Максимального значения функция (32) достигает при $\theta = \pi/2$, если

$$\beta_S^2 > 2\beta_I^2 \sum_j (1 - U_{j0}^2),$$

и при $\theta = 0$, если

$$\beta_S^2 < 2\beta_I^2 \sum_j (1 - U_{j0}^2).$$

В первом случае

$$D \approx \frac{1}{8\ln 2}\left\{\frac{\beta_S^2}{2} + \beta_I^2 \sum_j (1 - U_{j0}^2)\right\}, \tag{33}$$

во втором случае

$$D \approx \frac{\beta_S^2}{8\ln 2}. \tag{34}$$

Сравним полученные выражения с результатами предыдущего раздела. При учете поляризации ядерных спинов добавляются слагаемые к $I(\rho)$ и D. Вследствие этого меняется поведение на малых временах: $D/I(\rho)$ стремится не к нулю, как было согласно (21), а к конечному значению (31). Увеличивается это отношение и на больших временах, как можно заключить из сравнения (33) с (22). Наконец, из-за добавления слагаемого $\Delta\hat{\rho}_{IS}(t)$ (25), не коммутирующего с $\Delta\hat{\rho}_{SI}(t)$, изменится результат измерения фон Неймана на ядерных спинах. Теперь проектор (C.2) из собственных функций унитарного оператора $\hat{U}^{\pm}_{(f,e)}$ (4) изменяет состояние $\rho(t)$ (26), поэтому при измерении на ядерных спинах дискорд будет отличен от нуля.

Существует другой подход к анализу корреляций в многоспиновой системе, при котором выполняют редукцию матрицы плотности (26) к матрице плотности пары спинов [9, 38]. Выделим один из спинов окружения j и вычислим след по спиновым переменным всех остальных ядерных спинов. В результате получим редуцированную матрицу плотности двухспиновой системы:

$$\hat{\rho}_{Sj}(t) = \frac{1}{4}\left\{1 + U_0\left[-\beta_S(t)\hat{S}_x + \beta_I\hat{I}_{jz}\right] + \right. \\ + \beta_I\hat{S}_z\left[U_x\hat{I}_{jy} + U_y\hat{I}_{jx}\right] + \\ \left. + \beta_S(t)\hat{S}_y\left[U_y\hat{I}_{jy} + U_x\hat{I}_{jx}\right]\right\}. \tag{35}$$

Для упрощения формул мы перешли к обозначениям

$$\beta_S(t) = \beta_S \prod_{k(\neq j)} U_{k0}^{(f,e)}(t), \quad U_0 = U_{j0}^{(f,e)}(t), \\ U_x = U_{jx}^{(f,e)}(t), \quad U_y = U_{jy}^{(f,e)}(t). \tag{36}$$

После циклической замены спиновых операторов $(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ на $(\hat{S}_z, \hat{S}_x, \hat{S}_y)$ состояние (35) принимает вид X-состояния [9, 38]. При такой замене величина дискорда не изменится. Дискорд для X-состояния рассчитывался во многих работах. Вместо анализа сложных формул этих работ нам представляется более наглядным получить результат непосредственно для нашей простой модели в высокотемпературном приближении.

Для взаимной информации состояния (35) находим

$$I\left(\hat{\rho}_{Sj}(t)\right) = \frac{1}{8\ln 2}(1 - U_0^2)\left(\beta_S^2(t) + \beta_I^2\right). \tag{37}$$

С целью выделения классической части корреляций выполним ортогональное измерение с проекторами (6) над матрицей плотности (35). Оператор S_x входит в эту матрицу отдельно от оператора ядерного спина, поэтому не дает вкладов во взаимные информации как до измерений, так и после них. Поскольку $I\left(\hat{\Pi}_S\left(\hat{\rho}_{Sj}(t)\right)\right)$ не зависит от a_x, для достижения максимального значения сумма квадратов двух других направляющих косинусов должна быть максимальна, что достигается при $a_x = 0$, $a_z = \cos\varphi$, $a_y = \sin\varphi$. Находим

$$I\left(\hat{\Pi}_S\left(\hat{\rho}_{Sj}(t)\right)\right) = \frac{1}{16\ln 2}\left\{(1-U_0^2)\left(\beta_S^2(t)+\beta_I^2\right) - \right. \\ - \cos(2\varphi)(1-U_0^2)\left(\beta_S^2(t)-\beta_I^2\right) + \\ \left. + \sin(2\varphi)\beta_S(t)\beta_I U_x U_y\right\}. \quad (38)$$

Классическую часть корреляций можно выделить по-другому: проводя ортогональные измерения ядерного спина с помощью проекторов

$$\hat{\Pi}_{I\pm} = \frac{1}{2} \pm \left(b_x \hat{I}_{jx} + b_y \hat{I}_{jy} + b_z \hat{I}_{jz}\right),$$

где b_α — направляющие косинусы. Возьмем $b_z = 0$, $b_y = \cos\psi$, $b_x = \sin\psi$, поскольку оператор I_{jz} входит в матрицу (35) отдельно от оператора электронного спина и в $I\left(\hat{\Pi}_I\left(\hat{\rho}_{Sj}(t)\right)\right)$ нет вклада с b_z. В этом случае находим

$$I\left(\hat{\Pi}_I\left(\hat{\rho}_{Sj}(t)\right)\right) = \frac{1}{32\ln 2} \times \\ \times \left\{ \left(\beta_S^2(t)+\beta_I^2\right)\left[2(1-U_0^2)+\sin(2\psi)U_xU_y\right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2}\cos(2\psi)(U_y^2-U_x^2)\left(\beta_S^2(t)-\beta_I^2\right)\right\}. \quad (39)$$

Искомая величина классических корреляций определяется после нахождения максимальных значений функций (38) и (39) соответственно по углам φ и ψ. Из условия максимума получаем для (38) уравнение

$$\mathrm{tg}(2\varphi) = -\frac{U_xU_y\beta_I\beta_S(t)}{(1-U_0^2)\left(\beta_S^2(t)-\beta_I^2\right)},$$

а для (39) —

$$\mathrm{tg}(2\psi) = \frac{2U_xU_y\left(\beta_S^2(t)+\beta_I^2\right)}{(U_x^2-U_y^2)\left(\beta_S^2(t)-\beta_I^2\right)}.$$

Квантовый дискорд D_j определяется по формуле (7) после вычета этих классических корреляций из полных корреляций (37). При $\beta_I = 0$ (или $\beta_S = 0$) получаем $D_j = 0$. При ненулевых поляризациях дискорд D_j отличен от нуля, как при измерении по S, так и при измерении по I. В частности, при $\beta_S^2(t) = \beta_I^2 = \beta^2$ находим

$$D_j = \frac{\beta^2}{16\ln 2}\left\{2(1-U_0^2) - |U_xU_y|\right\}. \quad (40)$$

При других значениях параметров можно найти результаты для дискорда численно, по полученным формулам.

Интересно отметить, что на малых временах отношение $D_j/I\left(\hat{\rho}_{Sj}(t)\right)$ задается формулой (31) с заменой β_S^2 на $\beta_S^2(t)$. При этом величины дискордов в двух случаях разные, поскольку в случае полной матрицы плотности (26) взаимная информация (30) является суммой таковых для всех пар, представленных редуцированными матрицами (35).

Таким образом, выполненное исследование показало, что метод редуцированной к паре матрицы плотности качественно правильно описывает парные корреляции и динамику их квантовых и классических долей. Такие корреляции играют главную роль при $\beta_S \approx \beta_I$ на малых временах. На больших временах главная роль переходит к многоспиновым корреляциям. Парные корреляции затухают, что отражено в уменьшении $\beta_S(t)$ (36) в результатах, полученных для редуцированной матрицы плотности. В этом случае во взаимной информации остается слагаемое, пропорциональное β_I^2, которое не содержит квантовых корреляций. При полном учете всех корреляций взаимная информация (27) и дискорд (33) или (34), наоборот, достигают максимальных значений.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы исследовали динамику системы из электронного спина в окружении ядерных спинов в условиях наблюдения ССП и электронного спинового эха. Затухание наблюдаемых сигналов связано с образованием корреляций между электронным и ядерными спинами. В приближении центрального спина и высоких температур матрица плотности представлена в виде суммы членов с разным числом операторов ядерных спинов, ответственных за разные корреляции. При этом в условиях ССП и спинового эха образуются одни и те же комбинации спиновых операторов, коэффициенты перед которыми в этих двух случаях по-разному зависят от времени и величины магнитного поля. После проецирования на ортогональный базис часть таких членов теряется. Взаимная информация, рассчитанная по всем членам матрицы плотности, задает величину полных корреляций, а рассчитанная по членам, сохранившимся после проецирования, — величину классических корреляций. Их разность определяет величину квантовых корреляций, характеризуемых дискордом. Квантовые свойства рассматриваемой системы в настоящее время изучают по сигналам ССП и затухания амплитуды спинового эха, за величину которых ответственны члены с одним спиновым оператором. Существуют более сложные методики для измерения членов с большим числом спиновых операторов. Например, в работе [29] с помощью методики томографии квантового состояния были измерены двухспиновые члены в матрице плотности, тогда как в работе [24] для измерения членов с большим числом спиновых операторов предложено применять методику многоквантовой ЯМР-спектроскопии. Привлечение многоспиновых членов матрицы плотности позволит провести более тонкие исследования квантовых свойств электронно-ядерной системы.

ПРИЛОЖЕНИЕ A

Оператор эволюции

Свойства повышающих и понижающих операторов позволяют сделать следующие преобразования операторов эволюции ССП и спинового эха:

$$\begin{gathered}\exp\left(-it\hat{H}\right)S_+\exp\left(it\hat{H}\right)=\exp\left(-it\hat{H}_+\right)\times\\ \times\exp\left(it\hat{H}_-\right)\hat{S}_+\equiv\hat{U}_j^+(t)\hat{S}_+,\\ \exp\left(-it\hat{H}\right)\hat{P}_{180}\exp\left(-it\hat{H}_-\right)\hat{S}_-\times\\ \times\exp\left(it\hat{H}\right)\hat{P}_{180}\exp\left(it\hat{H}\right)=\\ =\exp\left(-it\hat{H}_+\right)\exp\left(-it\hat{H}_-\right)\times\\ \times\exp\left(it\hat{H}_+\right)\exp\left(it\hat{H}_-\right)\hat{S}_+=\\ =\exp\left(-it\hat{H}_+\right)\hat{U}_f^-(t)\times\\ \times\exp\left(it\hat{H}_-\right)\hat{S}_+\equiv\hat{U}_e^+(t)\hat{S}_+,\end{gathered}\tag{A.1}$$

где $\hat{P}_{180}$ — оператор поворота спина S на 180° вокруг оси x ВСК.

В случае $\hat{H}_{II}=0$ операторы в формуле (4) от разных ядерных спинов коммутируют между собой, что привело в результате к произведению их вкладов в (9). Рассмотрим вклад от взаимодействия с одним ядерным спином. Свойства матриц Паули позволяют выполнить следующее преобразование экспоненциальных операторов:

$$\begin{gathered}\exp\left(-it\Omega n_x\hat{I}_x-it\Omega n_z\hat{I}_z\right)=\\ =\cos(\Omega t/2)\hat{E}_2-i2\sin(\Omega t/2)\left\{n_x\hat{I}_x+n_z\hat{I}_z\right\},\end{gathered}\tag{A.2}$$

где $\hat{E}_2$ — единичная матрица. Последовательно применяя эту формулу к операторам в формуле (4) и выполнив необходимые преобразования, получаем результаты (9), (10). Между коэффициентами существует связь, вытекающая из свойства унитарности операторов эволюции:

$$\begin{gathered}\hat{U}^+_{j(f,e)}(t)\hat{U}^-_{j(f,e)}(t)=\\ =\left\{U_{j0}^{(f,e)}(t)+i\hat{I}_{jx}U_{jx}^{(f,e)}(t)+i\hat{I}_{jy}U_{jy}^{(f,e)}(t)\right\}\times\\ \times\left\{U_{j0}^{(f,e)}(t)-i\hat{I}_{jx}U_{jx}^{(f,e)}(t)-i\hat{I}_{jy}U_{jy}^{(f,e)}(t)\right\}=\\ =\left(U_{j0}^{(f,e)}(t)\right)^2+\frac{\left(U_{jx}^{(f,e)}(t)\right)^2}{4}+\\ +\frac{\left(U_{jy}^{(f,e)}(t)\right)^2}{4}=1.\end{gathered}\tag{A.3}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ B

Вычисление взаимной информации

Для матрицы плотности (3) находим редуцированные матрицы

$$\begin{gathered}\hat{\rho}_I(t)=\mathrm{Tr}_S\,\hat{\rho}(t)=\frac{2\hat{E}_I}{Z},\\ \hat{\rho}_S(t)=\mathrm{Tr}_I\,\hat{\rho}(t)=\\ =\frac{1}{2}\left[\hat{E}_S-\frac{\beta_S}{2}\left\{\hat{S}_+\tau_+(t)+\hat{S}_-\tau_-(t)\right\}\right],\end{gathered}\tag{B.1}$$

где

$$\tau_\pm(t)=\frac{1}{2^n}\,\mathrm{Tr}_I\,\hat{U}^\pm_{(f,e)}(t),$$

$\hat{E}_I$ и $\hat{E}_S$ — единичные матрицы. В высокотемпературном приближении используемые нами матрицы плотности имеют вид

$$\hat{\rho}=\frac{1}{Z}\left[1\pm\beta\Delta\hat{\rho}\right].$$

В низшем порядке по обратной температуре находим для энтропии фон Неймана [33, 34]:

$$\begin{gathered}S(\hat{\rho})=-\,\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\log_2\hat{\rho}\right\}=\\ =\log_2 Z-\frac{\beta^2}{2Z\ln 2}\,\mathrm{Tr}(\Delta\hat{\rho})^2.\end{gathered}\tag{B.2}$$

В этом приближении для взаимной информации (5) находим выражение

$$\begin{gathered}I(\hat{\rho})=\frac{\beta_S^2}{2\ln 2}\left\{\frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left(\Delta\hat{\rho}_{SI}\right)^2-\frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}_S\left(\Delta\hat{\rho}_S\right)^2-\right.\\ \left.-\frac{1}{2^n}\,\mathrm{Tr}_I\left(\Delta\hat{\rho}_I\right)^2\right\}=\frac{\beta_S^2}{8\ln 2}\left[1-\tau_+(t)\tau_-(t)\right],\end{gathered}\tag{B.3}$$

которое для системы (9) дает формулу (12).

Выполнив проецирование матрицы (3) с помощью проекторов (6) по формуле

$$\begin{gathered}\hat{\Pi}_S\left(\Delta\hat{\rho}_{SI}(t)\right)=\sum_{m=\pm}\left(\hat{\Pi}_{Sm}\otimes\hat{E}_I\right)\times\\ \times\Delta\hat{\rho}_{SI}(t)\left(\hat{\Pi}_{Sm}\otimes\hat{E}_I\right),\end{gathered}$$

получим

$$\hat{\Pi}_S\left(\Delta\hat{\rho}_{SI}(t)\right) = \frac{1}{4}\hat{\Pi}_{S+}\left\{a_x\left(\hat{U}^+_{(f,e)}(t)+\hat{U}^-_{(f,e)}(t)\right) + \right. \\ \left. + ia_y\left(\hat{U}^+_{(f,e)}(t) - \hat{U}^-_{(f,e)}(t)\right)\right\} - \\ - \frac{1}{4}\hat{\Pi}_{S-}\left\{a_x\left(\hat{U}^+_{(f,e)}(t) + \hat{U}^-_{(f,e)}(t)\right) + \right. \\ \left. + ia_y\left(\hat{U}^+_{(f,e)}(t) - \hat{U}^-_{(f,e)}(t)\right)\right\}. \quad \text{(B.4)}$$

В низшем порядке по обратной температуре для взаимной информации матрицы (B.4) находим

$$I\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho})\right) = S\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho}_S)\right) + S\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho}_I)\right) - \\ - S\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho})\right) = \frac{\beta_S^2}{2\ln 2}\left\{\frac{1}{Z}\operatorname{Tr}\left(\hat{\Pi}_S(\Delta\hat{\rho}_{SI})\right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{2}\operatorname{Tr}_S\left(\hat{\Pi}_S(\Delta\hat{\rho}_S)\right)^2 - \frac{1}{2^n}\operatorname{Tr}_I\left(\Delta\hat{\rho}_I\right)^2\right\}. \quad \text{(B.5)}$$

Для входящих в (B.5) слагаемых имеем

$$\operatorname{Tr}_I\left(\Pi_S\Delta\hat{\rho}_I\right)^2 = \operatorname{Tr}_I\left(\Delta\hat{\rho}_I\right)^2 = 0, \\ \operatorname{Tr}_S\left(\hat{\Pi}_S(\Delta\hat{\rho}_S)\right)^2 = \frac{(a_x\tau_{Re} - a_y\tau_{Im})^2}{2}, \\ \frac{1}{Z}\operatorname{Tr}\left(\hat{\Pi}_S(\Delta\hat{\rho}_{SI})\right)^2 = \frac{1}{2^{n+4}}\times \\ \times\operatorname{Tr}_I\left\{a_x\left(\hat{U}^+_{(f,e)}(t) + \hat{U}^-_{(f,e)}(t)\right) + \right. \\ \left. + ia_y\left(\hat{U}^+_{(f,e)}(t) - \hat{U}^-_{(f,e)}(t)\right)\right\}^2, \quad \text{(B.6)}$$

где τ_{Re} и τ_{Im} — действительная и мнимая части $\tau_\pm$. Для системы (9) $\tau_{Im} = 0$ и мы получаем из (B.6):

$$2\operatorname{Tr}_S\left(\hat{\Pi}_S(\Delta\hat{\rho}_S)\right)^2 = (\tau_{Re}a_x)^2 = a_x^2\prod_j U_{j0}^2(t), \\ \frac{8}{Z}\operatorname{Tr}\left(\hat{\Pi}_S(\Delta\hat{\rho}_{SI})\right)^2 = (a_x^2 + a_y^2) + (a_x^2 - a_y^2)\times \\ \times\prod_j\left\{U_{j0}^2(t) - \frac{1}{4}U_{jx}^2(t) - \frac{1}{4}U_{jy}^2(t)\right\} = \\ = (a_x^2 + a_y^2) + (a_x^2 - a_y^2)\prod_j\left\{2U_{j0}^2(t) - 1\right\}, \quad \text{(B.7)}$$

где в последней строке использовано свойство (A.3). Подставив (B.7) в (B.5), получим или (13), или соответствующий вклад в (28) в зависимости от выбора направляющих косинусов, указанных в тексте.

Проведем аналогичные вычисления для вклада от ядер (25). Во-первых, вычислив в этом состоянии редуцированные матрицы

$$\operatorname{Tr}_I\hat{\rho}_{IS}(t) = 0, \quad \Delta\hat{\rho}_I(t) = \operatorname{Tr}_S\hat{\rho}_{IS}(t) = \sum_j\hat{I}_{jz}U_{j0}(t)$$

и энтропии фон Неймана при учете того, что

$$\operatorname{Tr}\left\{\hat{\rho}(t)\log_2\hat{\rho}(t)\right\} = \operatorname{Tr}\left\{\hat{\rho}(0)\log_2\hat{\rho}(0)\right\} = \\ = \frac{\beta_S^2 + n\beta_I^2}{8\ln 2} - (n+1),$$

получим (27). Во-вторых, выполнив ортогональное измерение фон Неймана с проекторами (6), находим

$$\hat{\Pi}_S\left(\Delta\hat{\rho}_{IS}(t)\right) = \sum_j\left\{U_{j0}^{(f,e)}(t)\hat{I}_{jz}\right\} + \\ + \frac{1}{2}\hat{\Pi}_{S+}a_z\sum_j\left\{\hat{I}_{jy}U_{jx}^{(f,e)}(t) + \hat{I}_{jx}U_{jy}^{(f,e)}(t)\right\} - \\ - \frac{1}{2}\hat{\Pi}_{S-}a_z\sum_j\left\{\hat{I}_{jy}U_{jx}^{(f,e)}(t) + \hat{I}_{jx}U_{jy}^{(f,e)}(t)\right\}$$

и соответствующий вклад в (28) по формуле (B.5), переписанной для этого случая.

ПРИЛОЖЕНИЕ C

Вычисление в ортогональном базисе ядерной системы

Введем базис $|\Theta_k\rangle$ из $N = 2^n$ собственных функций операторов эволюции (4)

$$\hat{U}^\pm_{(f,e)}|\Theta_k\rangle = \exp(\pm i\Theta_k)|\Theta_k\rangle \quad \text{(C.1)}$$

и операторы проецирования на эти состояния

$$\hat{\Pi}_k = |\Theta_k\rangle\langle\Theta_k|. \quad \text{(C.2)}$$

Запишем матрицу плотности (3) в этом представлении

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{Z}\left\{1 - \frac{\beta_S}{2}\sum_k\left[\hat{S}_+\exp(i\Theta_k) + \right.\right. \\ \left.\left. + \hat{S}_-\exp(-i\Theta_k)\right]\otimes|\Theta_k\rangle\langle\Theta_k|\right\} = \frac{1}{Z}\times \\ \times\left\{1 - \beta_S\sum_k\left[\hat{S}_x\cos\Theta_k - \hat{S}_y\sin\Theta_k\right]\otimes\right. \\ \left. \otimes|\Theta_k\rangle\langle\Theta_k|\right\}. \quad \text{(C.3)}$$

Взаимная информация задается формулой (B.3), в которой

$$\tau_\pm(t) = \frac{1}{2^n}\sum_k\exp(\pm i\Theta_k). \quad \text{(C.4)}$$

Выполним проецирование матрицы (C.3) с помощью проекторов (6) при $a_z = 0$, $a_x = \cos\varphi$, $a_y = \sin\varphi$:

$$\hat{\Pi}_S\left(\Delta\hat{\rho}_{SI}(t)\right) = \frac{1}{2}\sum_k \left\{\hat{\Pi}_{S+}\cos(\varphi+\Theta_k)\otimes|\Theta_k\rangle\langle\Theta_k| - \hat{\Pi}_{S-}\cos(\varphi+\Theta_k)\otimes|\Theta_k\rangle\langle\Theta_k|\right\}. \quad (C.5)$$

В этом случае

$$\frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left(\hat{\Pi}_S\left(\Delta\hat{\rho}_{SI}\right)\right)^2 = \frac{1}{2^{n+2}}\sum_k \cos^2(\varphi+\Theta_k)$$

и по формуле (B.5) находим

$$I\left(\hat{\Pi}_S(\hat{\rho})\right) = \frac{\beta_S^2}{8\ln 2}\left\{\frac{1}{2^n}\sum_k \cos^2(\varphi+\Theta_k) - (\tau_{Re}\cos\varphi - \tau_{Im}\sin\varphi)^2\right\}. \quad (C.6)$$

Отметим, что для модели (9)

$$\exp(i\Theta_k) = \prod_j \exp(i\Theta_k^j),$$

где Θ_k^j при разных k принимает одно из двух значений $\pm 2\arcsin\sqrt{v_j/2}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. L. Hahn, Phys. Rev. **80**, 580 (1950).
2. К. М. Салихов, А. Г. Семенов, Ю. Д. Цветков, *Электронное спиновое эхо и его применение*, Наука, Новосибирск (1976).
3. Б. Блюмих, *Основы ЯМР*, Техносфера, Москва (2007).
4. Дж. Уо, *Новые методы ЯМР в твердых телах*, Мир, Москва (1978).
5. R. A. Jalabert and H. M. Pastawski, Phys. Rev. Lett. **86**, 2490 (2001).
6. К. А. Валиев, А. А. Кокин, *Квантовые компьютеры: надежды и реальность*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Москва–Ижевск (2001).
7. М. Нильсен, И. Чанг, *Квантовые вычисления и квантовая информация*, Мир, Москва (2006). [M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2000)].
8. Д. Прескилл, *Квантовая информация и квантовые вычисления*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Москва–Ижевск, т. 1 (2008) (т. 2 (2011)). [J. Preskill, *Quantum Information and Computation*. Lecture Notes for Phys. 229, California Institute of Technology (1998)].
9. K. Modi, A. Brodutch, H. Cable et al., Rev. Mod. Phys. **84**, 1655 (2012).
10. Г. Г. Козлов, ЖЭТФ **132**, 918 (2007).
11. W. M. Witzel, M. S. Carroll, L. Cywinski, and S. D. Sarma, Phys. Rev. B **86**, 035452 (2012).
12. Nan Zhao, Sai-Wah Ho, and Ren-Bao Liu, Phys. Rev. B **85**, 115303 (2012).
13. L. T. Hall, J. H. Cole, and L. C. L. Hollenberg, arXiv:1309.5921.
14. J. Hackmann and F. B. Anders, Phys. Rev. B **89**, 045317 (2014).
15. J. J. L. Morton and B. W. Lovett, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **2**, 189 (2011).
16. E. Knill and R. Laflamme, Phys. Rev. Lett. **81**, 5672 (1998).
17. A. Datta, A. Shaji, and C. M. Caves, Phys. Rev. Lett. **100**, 050502 (2008).
18. A. F. Fahmy, R. Max, W. Bermel, and S. J. Glasser, Phys. Rev. A **78**, 022317 (2008).
19. S. Wu, U. V. Poulsen, and K. Molmer, Phys. Rev. A **80**, 032319 (2009).
20. G. Passante, O. Moussa, C. A. Ryan, and R. Laflamme, Phys. Rev. Lett. **103**, 250501 (2009).
21. B. Dakic, V. Vedral, and C. Brukner, Phys. Rev. Lett. **105**, 190502 (2010).
22. A. Datta and A. Shaji, Int. J. Quant. Inf. **9**, 1787 (2011).
23. G. Passante, O. Moussa, and R. Laflamme, Phys. Rev. A **85**, 032325 (2012).
24. M. Mehring and J. Mende, Phys. Rev. A **73**, 052303 (2006).
25. T. Morimae, K. Fujii, and J. F. Fitzsimons, Phys. Rev. Lett. **112**, 130502 (2014).
26. E. I. Kuznetsova and A. I. Zenchuk, Phys. Lett. A **376**, 1029 (2012).
27. A. Y. Chernyavskiy, S. I. Doronin, and E. B. Fel'dman, Phys. Scripta T **160**, 014007 (2014).
28. В. Е. Зобов, ТМФ **177**, 111 (2013).

29. X. Rong, F. Jin, and Z. Wang, Phys. Rev. B **88**, 054419 (2013).

30. F. Reinhard, F. Shi, N. Zhao et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 200402 (2012).

31. A. Laraoui, F. Dolde, C. Burk et al., Nature Comm. **4**, 1651 (2013).

32. T. Fink and H. Bluhm, arXiv:1402.0235.

33. А. Абрагам, М. Гольдман, *Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок*, Мир, Москва (1984).

34. R. Auccaise, L. C. Celeri, D. O. Soares-Pinto et al., Phys. Rev. Lett. **107**, 140403 (2011).

35. F. Galve, G. L. Giorgi, and R. Zambrini, Europhys. Lett. **96**, 40005 (2011).

36. D. P. DiVincenzo, M. Horodecki, D. W. Leung et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 067902 (2004).

37. S. Boixo, L. Aolita, D. Cavalcanti et al., Int. J. Quant. Inf. **9**, 1643 (2011).

38. E. B. Fel'dman, E. I. Kuznetsova, and M. A. Yurishchev, J. Phys. A: Math. Theor. **45**, 475304 (2012).