

核磁共振中的量子控制

李俊 崔江煜 杨晓东 罗智煌 潘健 余琦 李兆凯 彭新华 杜江峰

Quantum control of nuclear magnetic resonance spin systems

Li Jun Cui Jiang-Yu Yang Xiao-Dong Luo Zhi-Huang Pan Jian Yu Qi Li Zhao-Kai Peng Xin-Hua Du Jiang-Feng

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 167601 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.167601

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.167601>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphys.ac.cn/CN/Y2015/V64/I16>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

利用量子相干性判定开放二能级系统中非马尔可夫性

[Non-Markovianity of open two-level system by means of quantum coherence](#)

物理学报.2015, 64(14): 140302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.140302>

三维传输子量子比特的退相干参数表征

[Decoherence characterization of three-dimensional transmon](#)

物理学报.2014, 63(22): 220305 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.220305>

表面离子阱的衬底效应模型研究及新型离子阱设计

[Substrate effect on surface-electrode ion trap and hybrid design for ion trap](#)

物理学报.2014, 63(6): 060303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.060303>

优化重聚脉冲提高梯度场核磁共振信号强度

[Optimization of nuclear magnetic resonance refocusing pulses to enhance signal intensity in gradient Bfield](#)

物理学报.2013, 62(14): 147602 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.147602>

初态对光波导阵列中连续量子行走影响的研究

[Effects of initial states on continuous-time quantum walk in the optical waveguide array](#)

物理学报.2013, 62(9): 090301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.090301>

## 专题: 量子精密计量与操控

## 核磁共振中的量子控制\*

李俊<sup>1)</sup> 崔江煜<sup>1)</sup> 杨晓东<sup>1)</sup> 罗智煌<sup>1)</sup> 潘健<sup>1)</sup> 余琦<sup>1)</sup> 李兆凯<sup>1)</sup>  
彭新华<sup>1)2)†</sup> 杜江峰<sup>1)2)</sup>

1) (中国科学技术大学近代物理系, 合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026)

2) (中国科学技术大学, 量子信息与量子科技前沿协同创新中心, 合肥 230026)

(2015年4月29日收到; 2015年6月12日收到修改稿)

近年来, 随着量子信息科学的发展, 对由量子力学原理描述的微观世界的主动调控已成为重要的前沿研究领域. 为构造实际的量子信息处理器, 一个关键的挑战是: 如何对处于噪声环境下的量子体系实现一系列高精度的任意操作, 以完成目标量子信息处理任务. 为此, 人们将经典系统控制论的思想方法延伸到量子体系的领域, 提出了大量的量子控制方法以及相关的数值技术 (如量子优化控制、量子反馈控制等), 并取得了丰富的研究成果. 核磁共振自旋体系具备成熟的系统理论和操控技术, 为量子控制方法的实用性研究提供了优秀的实验测试平台. 因此, 基于核磁共振的量子控制成为量子控制领域的重要方向. 本文简要介绍了量子控制的基本概念和方法; 从系统控制论的角度对核磁共振自旋体系的基本原理和重要控制任务做了阐述; 介绍了近些年来在该领域发展的相关控制方法及其应用; 对基于核磁共振体系的量子控制的进一步的研究做了几点展望.

关键词: 量子控制, 量子计算, 核磁共振

PACS: 76.60.-k, 03.65.Yz, 03.67.Lx

DOI: 10.7498/aps.64.167601

## 1 量子控制与核磁共振

一个世纪以来, 量子力学在解释微观物理现象方面取得了巨大的成功. 直到最近数十年, 人们开始不仅仅只是寻求对微观世界的描述, 还关心如何去调控量子系统以完成所需的动力学演化. 调控量子系统逐渐成为重要的前沿科研领域, 并诞生了丰富的研究成果<sup>[1-4]</sup>. 这在很大程度上得益于人们对发展量子计算与量子信息技术的极大兴趣. 由于基于量子力学原理的计算机被认为具有本质上优于经典计算机的计算能力<sup>[5,6]</sup>, 人们投入极大的精力寻求构建实际可行的量子物理计算体系. 而应用量子物理机制来进行信息处理的一个核心问题

是: 对由量子力学描述的微观体系进行精确而有效的操控是量子控制的主要研究目标. 量子控制论可看作是经典控制论在量子领域的延伸. 然而由于量子体系相比于经典情形所具有的独特性质 (如纠缠、退相干、测量坍缩等), 常常并不能简单地直接将经典控制理论 (如优化、反馈、噪声、滤波等核心概念) 应用于量子体系. 因此发展适用于量子体系的量子控制方法, 以及在实际物理体系中应用这些控制方法来实现特定的控制任务, 就成为量子控制研究的主要内容.

上述量子控制发展的一般图景, 十分适用于描述基于核磁共振体系的量子控制的研究方向. 经过半个多世纪的发展, 核磁共振 (NMR) 谱学已经发展成为十分成熟的实验学科. 人们能够定量地

\* 国家重点基础研究发展规划 (批准号: 2013CB921800, 2014CB848700)、国家杰出青年科学基金 (批准号: 11425523)、国家自然科学基金 (批准号: 11375167, 11227901, 91021005)、中国科学院战略性先导科技专项 (B) (批准号: XDB01030400) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20113402110044) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xhpeng@ustc.edu.cn

刻画实验条件、从实验结果中获取有用信息、对实验现象做出可靠的解释以及通过计算机进行高精度的数值仿真。在现代NMR谱学中,可以做到对多达数百个核自旋组成的大分子样品上施加十分复杂的脉冲序列。因此,核磁共振技术成为研究物质微观结构的最精密的探测手段之一。而随着量子信息技术的发展,提出了基于NMR的核自旋量子信息处理的物理实现方案<sup>[6,7]</sup>,这进一步使人们对核自旋动力学的调控达到了新的水平<sup>[8,9]</sup>。NMR核自旋体系作为量子信息处理器,具有较长的相干时间,已经被用来很好地演示许多量子算法(如Deutsch-Jozsa算法<sup>[10,11]</sup>、Grover搜索算法<sup>[12]</sup>、Shor大数分解算法<sup>[13]</sup>、量子随机行走<sup>[14]</sup>、量子模拟(如氢分子能级模拟<sup>[15]</sup>、观测Heisenberg模型的基态几何相<sup>[16]</sup>、模拟任意子分数统计<sup>[17]</sup>)以及其他量子信息处理方案<sup>[18,19]</sup>。在NMR体系上,人们还实现了12个量子比特的相干操控,迄今为止这依然是实现的最大量子寄存器的普适操控<sup>[20,21]</sup>。最近,人们又完成了在7个量子比特体系上对复杂Clifford门的门平均保真度的实验估计(结果约为55.1%),这也在一定程度上代表了当前人们在该方向达到的操控精度水平<sup>[22]</sup>。这些实验的实现与NMR量子控制技术的发展息息相关,特别是量子控制理论与方法在NMR体系中的应用。NMR已经成为当前测试和发展量子控制技术以及量子信息处理任务的重要物理平台。

本文介绍基于NMR的量子控制。文章的结构如下:首先对量子控制的基本概念做简单的描述,接着从控制论的角度对NMR核自旋系统作为受控系统建立控制模型,然后简要讨论近些年所发展的NMR中的量子控制方法,最后给出展望。

## 2 量子控制的基本概念简介

量子系统的演化是由量子力学原理支配的<sup>[23]</sup>。量子力学原理有其一套形式化的数学描述框架,包括对量子态、量子操作、量子测量等基本概念的严格定义。基于这样的量子力学框架,建立受控量子系统的定量且适用的控制模型,是实现对其精确主动操控的重要基础。最一般地,可将所研究的对象分类为封闭系统和开放系统。如果一个量子系统不与其他量子系统产生任何能量、物质和信息交换,我们称该系统是封闭的(或孤立的)。有时在已知的

量子系统-控制手段作用方式的情形下(比如对原子施加激光场),也认为该系统是封闭的<sup>[24]</sup>。当然大多数实际情形是受控系统还时刻受到环境噪声的影响,此时研究开放系统动力学的性质就十分必要。因此,总体而言,设计精确可行的量子控制方案,离不开对系统的动态演化、制备与测量过程以及环境噪声等方面做严格的刻画。

由于量子控制领域的广泛性,要全面介绍是很困难的。因此,本文主要集中于NMR量子控制中涉及的基本概念及主要方法。更深入的关于量子力学基本原理以及量子控制基本概念的介绍可参考文献<sup>[1, 2, 6, 23, 25, 26]</sup>。

### 2.1 量子态

在量子力学中,量子态是由复Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 中的单位矢量描述的,这一单位矢量通常可用Dirac符号标记为 $|\psi\rangle$ ,此时量子系统的态称为纯态(pure state)。以两能级纯态系统为例,其状态可表示为

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (1)$$

其中 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。根据量子力学的几率幅假设, $|\psi\rangle$ 处于 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态的几率分别为 $|\alpha|^2$ 和 $|\beta|^2$ 。这种叠加性显示出量子系统状态描述与经典情形的本质不同。一个二能级系统可以看作一个量子比特,例如处于磁场中发生塞曼分裂(Zeeman splitting)的自旋(图1(a))。

为了分析和应用的方便,通常在球坐标系里表示态 $|\psi\rangle$ ,

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left( \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\varphi} \sin(\theta/2)|1\rangle \right), \quad (2)$$

其中 $\gamma \in \mathbb{R}$ ,  $\theta \in [0, \pi]$ ,  $\varphi \in [0, 2\pi)$ 。由于整体相位 $\gamma$ 不具有可观测的物理效应,可认为 $|\psi\rangle$ 和 $e^{-i\gamma}|\psi\rangle$ 表示的是同一个物理状态。于是上式简化为

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\varphi} \sin(\theta/2)|1\rangle. \quad (3)$$

图1(b)形象地给出了单量子比特纯态的几何表示。

为了描述一般的量子系统(纯态或混态),需要引入密度矩阵(density matrix)的概念。假设一个量子系统是由一组纯态 $\{|\psi_j\rangle\}$ 按一定的几率分布 $\{p_j\}$ 混合组成,则相应的密度矩阵定义为

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|, \quad (4)$$

其中  $p_j \geq 0$ , 且  $\sum_j p_j = 1$ . 换句话说, 密度矩阵即是一组纯态的凸组合. 对任意密度矩阵  $\rho$  都有  $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$ . 满足  $\text{Tr}(\rho^2) < 1$  的量子态称作混态 (mixed state), 否则系统处于纯态, 即  $\rho$  具有  $|\psi\rangle\langle\psi|$  ( $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ) 的形式. 因此我们定义  $p(\rho) = \text{Tr}(\rho^2)$  是在密度算符空间上的纯度函数.

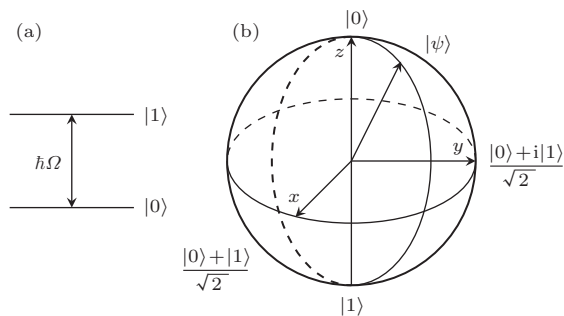


图1 (a) 二能级系统 (能级差为  $\hbar\Omega$ ) 作为一个量子比特; (b) 单比特量子纯态的 Bloch 矢量表示  
Fig. 1. (a) Two-level system as a quantum bit; (b) Bloch vector representation for a qubit in pure state.

在态空间引入距离的概念以表示态与态之间的相似程度是十分有用的. 比如通过度量施加该控制后得到的末态与理论预期的目标态之间的接近程度可以用来评估某实际控制的效果. 最常用的一个度量是量子态保真度 (quantum state fidelity) [6,8]. 在经典情况下, 两个概率分布  $\{p_x\}$  和  $\{q_x\}$  的相似度可由  $F(p_x, q_x) = \sum_x \sqrt{p_x q_x}$  来表征. 类似地, 两个纯态  $|\psi\rangle$  和  $|\phi\rangle$  的保真度定义为

$$F(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = |\langle\psi|\phi\rangle|^2, \quad (5)$$

易知  $0 \leq F \leq 1$ . 简单地说, 保真度反映了两个量子态的交叠程度, 若两个量子态完全一样, 则此交叠程度达到最大值 1. 对于混态, 系统状态须用密度矩阵表示. 一个纯态  $|\psi\rangle$  和一个混态  $\rho$  之间的保真度的表达式为

$$F(|\psi\rangle, \rho) = \sqrt{\langle\psi|\rho|\psi\rangle}. \quad (6)$$

当  $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ , 就退化到两个纯态的保真度公式 (5). 描述两个混态  $\rho$  和  $\sigma$  之间的保真度, 则定义为

$$F(\sigma, \rho) = \text{Tr}\sqrt{\sqrt{\sigma}\rho\sqrt{\sigma}}. \quad (7)$$

表达式中的  $\rho$  和  $\sigma$  是对称的, 只要其中一个是纯态, 就退化到 (6) 式的情形.

在量子控制中, 往往需要研究两个甚至多个系统的相互作用, 这时就需要引入更大的

Hilbert 空间去描述整个系统的状态. 以两体系统为例, 总的空间是两个子系统空间的直积, 即  $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , 复合空间的维度为  $\text{dim}(\mathcal{H}_{AB}) = \text{dim}(\mathcal{H}_A)\text{dim}(\mathcal{H}_B)$ . 对于两体系统的任意纯态矢量  $|\psi\rangle_{AB} \in \mathcal{H}_{AB}$  可以写为一个子系统的线性组合, 即

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{k,l} \alpha_{kl} |a_k\rangle_A \otimes |b_l\rangle_B, \quad (8)$$

其中  $\alpha_{k,l} \in \mathbb{C}$ , 且  $\sum_{k,l} |\alpha_{k,l}|^2 = 1$ . 这里  $\{|a_k\rangle\}$  和  $\{|b_l\rangle\}$  分别为 Hilbert 空间  $\mathcal{H}_A$  和  $\mathcal{H}_B$  的正交完备基矢. 如果纯态  $|\psi\rangle_{AB}$  能够写为  $|\psi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\phi'\rangle_B$  的形式, 这里纯态  $|\phi\rangle_A \in \mathcal{H}_A$ ,  $|\phi'\rangle_B \in \mathcal{H}_B$ , 此时系统的态  $|\psi\rangle_{AB}$  称为直积态 (product state), 否则此两体系统就处于纠缠态 (entangled state). 对于一般的混态  $\rho_{AB} \in \mathcal{H}_{AB}$  可以写为

$$\rho_{AB} = \sum_{k,k'} \sum_{l,l'} \rho_{kk',ll'} |a_k\rangle_A \langle a_{k'}| \otimes |b_l\rangle_B \langle b_{l'}|. \quad (9)$$

当且仅当  $\rho_{AB} = \sum_i p_i \rho_{iA} \otimes \rho_{iB}$ , 两体系统的态是可分离的 (separable state), 否则此两体系统就是纠缠的. 纠缠性是量子体系独有的性质, 在量子计算和量子通信中起着至关重要的作用.

## 2.2 量子逻辑门

在量子计算中, 通过对量子态进行一系列酉变换来实现某些逻辑功能的量子操作称作量子门. 量子门是在物理上实现量子计算的基础, 量子门通常由幺正矩阵表示, 即满足  $U^\dagger U = I$  ( $I$  为单位矩阵) 的复矩阵  $U$ .

单比特量子门可由  $2 \times 2$  的矩阵表示, 其中最基本的是泡利矩阵:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

应用的比较广泛的有 Hadamard 门 (记为  $\mathbf{H}$ ),  $\pi/8$  门 (记为  $\mathbf{T}$ )

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix},$$

以及旋转变换

$$U = R_n(\theta) = \exp\left[-\frac{i\theta}{2} (\mathbf{n}_x \mathbf{X} + \mathbf{n}_y \mathbf{Y} + \mathbf{n}_z \mathbf{Z})\right],$$

其中  $\mathbf{n} = (\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y, \mathbf{n}_z)$  为转动轴方向的单位矢量 (即满足  $\mathbf{n}_x^2 + \mathbf{n}_y^2 + \mathbf{n}_z^2 = 1$ ),  $\theta$  为转动角度.

多比特量子门的典型是受控非门 (controlled-NOT gate), 记作 CNOT, 它是一个两比特量子逻辑门, 其形式为

$$U_{\text{CNOT}} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

如果用  $|c\rangle$  表示控制比特, 用  $|t\rangle$  表示目标比特, 其作用可以表示为:  $|c\rangle|t\rangle \rightarrow |c\rangle|t \oplus c\rangle$ ,  $\oplus$  表示模 2 加法, 即控制比特是  $|1\rangle$  时目标比特翻转, 是  $|0\rangle$  时则不做操作. 受控非门的重要性是基于这样一个事实: 任意的多量子比特门都可以分解成受控非门和单量子比特门的组合 [6,27].

### 2.3 量子测量

为了更好地控制量子系统, 往往需要通过不同方式的测量从受控的系统中获取必要的信息. 量子测量和经典测量有着极大的区别, 因为测量一个量子系统将不可避免地对其造成影响 [28]. 量子力学中具有可观测的物理特性的量 (可观测量) 可由 Hilbert 空间中的厄米算符来表示. 由于海森堡不确定性原理的限制, 同时观察两个不对易的可观测量是不可能的.

根据量子力学的测量公理, 量子测量由一组测量算子  $\{M_m\}$  描述, 满足完备性方程  $\sum_m M_m^\dagger M_m = I$ , 指标  $m$  表示实验中可能的测量结果. 若测量前的量子态为  $|\psi\rangle$ , 则结果  $m$  发生的概率为

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle, \quad (11)$$

测量后的量子态变为

$$\frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}. \quad (12)$$

当上述的测量算子  $M_m$  为正交投影算子, 即满足  $M_m M_n = \delta_{mn} M_m$  时, 上述的一般量子测量便退化为投影测量 (projective measurement). 投影测量是可重复的. 然而在量子力学中许多重要的测量都不是投影性测量, 因此需要考虑以上的一般量子测量公理. 当只关心量子测量的统计, 而并不关心测量后的状态时, 可采用正算子值测度 (positive operator-valued measure, POVM) 测量方法进行分析, 其 POVM 测量算子定义为正

定算子  $E_m = M_m^\dagger M_m$ , 满足  $\sum_m E_m = I$  及  $p(m) = \langle \psi | E_m | \psi \rangle$ .

### 2.4 动力学: 封闭系统与开放系统

封闭量子系统的演化方程最早由 Schrödinger 在 1926 年建立 [29]. 对于一个处于纯态  $|\psi(t)\rangle$  的封闭系统, 其时间演化由 Schrödinger 方程描述

$$i\dot{|\psi(t)\rangle} = -i\mathbf{H}(t)|\psi(t)\rangle, \quad (13)$$

这里我们约定  $\hbar = 1$ ,  $\mathbf{H}(t)$  是系统哈密顿量算符. 若系统处于混态  $\rho(t)$ , 其时间演化就由 Liouville-von Neumann 方程描述

$$\dot{\rho}(t) = -i[\mathbf{H}(t), \rho(t)]. \quad (14)$$

如果量子系统与外界环境存在耦合, 称该系统是开放的. 图 2 为开放系统演化示意图. 一个开放量子系统总可看作是更大的封闭系统的子系统. 将所关心的这个子系统称作系统, 而将封闭系统的其他部分统称为环境. 设系统和环境的总哈密顿量具有如下形式:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_E + \mathbf{H}_I, \quad (15)$$

其中  $\mathbf{H}_S$ ,  $\mathbf{H}_E$ ,  $\mathbf{H}_I$  分别是系统、环境以及系统-环境之间相互作用的哈密顿量. 设整体系统处于状态  $\sigma(t)$ , 那么根据 Liouville 方程, 有

$$\dot{\sigma}(t) = -i[\mathbf{H}(t), \sigma(t)]. \quad (16)$$

定义系统的演化状态为

$$\rho(t) = \text{Tr}_E \sigma(t), \quad (17)$$

则得

$$\dot{\rho}(t) = -i\text{Tr}_E ([\mathbf{H}(t), \sigma(t)]). \quad (18)$$

推导系统的演化方程, 就是要将环境对系统的影响以一组物理参数来表征. 在 (18) 式中为了能得到  $\rho(t)$  的显式动态方程, 就需要对环境做偏迹运算. 这一点不可能在任意情形的环境下都能做到. 显然, 不同的系统-环境相互作用导致的量子过程是不一样的. 常见的开放量子过程包括耗散、退相干、弛豫、Markovian 或 non-Markovian 等.

在量子信息领域, 人们十分关心的是环境对系统造成的退相干影响. 在信息处理中, 常常将环境看作系统的噪声来源, 例如 NMR 样品中分子热运动导致核自旋系综的弛豫过程. 为了定量地刻画这些噪声的影响, 需要建立系统动力学的演化方程.

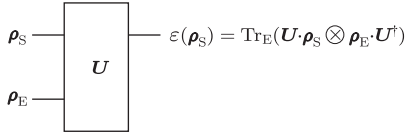


图2 开放系统演化示意图, 设系统初态为直积态, 整个体系在么正演化下, 对所关心的系统部分的动力学描述可通过取环境偏迹得到

Fig. 2. Illustration of open system evolution. Assume the initial state is the product of system state and environmental state. Suppose the total system is under unitary evolution, then the concerned subsystem evolution can be obtained by partial tracing the environmental effects.

一种较普适的、描述开放量子体系演化的方式由Kraus表示(Kraus representation, 也称为operator-sum representation) 给出<sup>[6,30]</sup>. Kraus表示定理指出, 定义在Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 上的一个量子通道(quantum channel)总可有如下表示:

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_k \mathbf{E}_k \rho \mathbf{E}_k^\dagger, \quad (19)$$

其中 $\{\mathbf{E}_k\}$ 为 $\mathcal{H}$ 中的一组算符, 且满足完备性关系

$$\sum_k \mathbf{E}_k^\dagger \mathbf{E}_k = \mathbf{I}. \quad (20)$$

这里我们考虑的是保迹的情形, 即 $\mathcal{E}$ 本身完全描述了这个量子操作的过程. 算子 $\{\mathbf{E}_k\}$ 是量子通道 $\mathcal{E}$ 的操作元素, 有时被称为噪声算子(noise operator)或误差算子(error operator), 因为它们反映了环境对系统的干扰效应.

Kraus表示可以看作开放系统的一种输入-输出模型, 有时我们更希望获得系统状态时间演化的模型, 这方面研究较多的是Markovian量子系统. 通常情况下, 对处于耗散过程的受控量子系统, 可假设其处于Markovian环境, 此时系统动力学可由Lindblad方程描述<sup>[28,31,32]</sup>:

$$\dot{\rho}(t) = \hat{\mathbf{L}}\rho(t) = -i[\mathbf{H}, \rho(t)] + \hat{\mathbf{R}}\rho(t), \quad (21)$$

其中 $\hat{\mathbf{R}}$ 代表系统演化的非么正超算符, 描述耗散演化部分:

$$\hat{\mathbf{R}}\rho = \sum_{m,n=1}^{N^2-1} \lambda_{mn} (2\mathbf{L}_n \rho \mathbf{L}_m^\dagger - \mathbf{L}_m^\dagger \mathbf{L}_n \rho - \rho \mathbf{L}_m^\dagger \mathbf{L}_n), \quad (22)$$

这里 $\{\mathbf{L}_m\}_{m=1, \dots, N^2-1}$ 是系统Hilbert空间上的任意一组线性算子基底,  $\{\lambda_{mn}\}$ 是一组动力学参数. 系数矩阵 $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_{mn})$ 必须是正定的, 以保证方程具有保迹(trace-preserving)和完全正(completely

positive)的性质. Lindblad方程可进一步写成对角形式:

$$\dot{\rho} = -i[\mathbf{H}, \rho] + \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \gamma_\alpha (2\mathbf{L}_\alpha \rho \mathbf{L}_\alpha^\dagger - \rho \mathbf{L}_\alpha^\dagger \mathbf{L}_\alpha - \mathbf{L}_\alpha^\dagger \mathbf{L}_\alpha \rho). \quad (23)$$

在环境常定的情形下, 经常可以假定Lindblad方程的弛豫超算子 $\hat{\mathbf{R}}$ 是不含时的, 这将大大简化对系统演化的分析.

下面给出几个基本的量子过程的Kraus表示和相应的主方程描述<sup>[33]</sup>. 定义自旋算符 $\mathbf{I}_x = \mathbf{X}/2$ ,  $\mathbf{I}_y = \mathbf{Y}/2$ 及 $\mathbf{I}_z = \mathbf{Z}/2$ .

**例1** (相位衰减通道: phase damping channel) 单比特系统的相位衰减通道常用来描述其横向弛豫 $T_2$ 过程, 其Kraus表示如下:

$$\mathcal{E}(\rho) = (1-p)\rho + p\mathbf{I}_z \rho \mathbf{I}_z, \quad (24)$$

其中 $p = \frac{1}{2}(1 - e^{-t/T_2})$ . 相应的主方程是

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2T_2} [\mathbf{I}_z, [\mathbf{I}_z, \rho]], \quad (25)$$

其中 $\mathbf{I}_z/\sqrt{2T_2}$ 是Lindblad算子.

**例2** (幅度衰减通道: amplitude damping channel) 单比特系统的幅度衰减通道常用来描述其纵向弛豫 $T_1$ 过程, 其Kraus表示如下:

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_k \mathbf{E}_k \rho \mathbf{E}_k^\dagger. \quad (26)$$

其中 $\{\mathbf{E}_k\}$ 为Kraus算子:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0 &= \sqrt{p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\gamma} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{E}_1 &= \sqrt{p} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\gamma} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{E}_2 &= \sqrt{1-p} \begin{pmatrix} \sqrt{1-\gamma} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{E}_3 &= \sqrt{1-p} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{\gamma} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

其中 $p$ 表征热平衡态的极化, 且 $\gamma = 1 - e^{-t/T_1}$ . 相应的主方程是

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= \frac{p}{T_1} \left[ \mathbf{I}^+ \rho \mathbf{I}^- - \frac{1}{2} (\mathbf{I}^- \mathbf{I}^+ \rho + \rho \mathbf{I}^- \mathbf{I}^+) \right] \\ &+ \frac{1-p}{T_1} \left[ \mathbf{I}^- \rho \mathbf{I}^+ - \frac{1}{2} (\mathbf{I}^+ \mathbf{I}^- \rho + \rho \mathbf{I}^+ \mathbf{I}^-) \right], \end{aligned} \quad (27)$$

其中上升算符和下降算符分别为

$$I^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

这里 Lindblad 生成子由  $\sqrt{p/T_1}I^+, \sqrt{(1-p)/T_1}I^-$  给出.

对于 Markovian 量子过程, Kraus 表示与 Lindblad 主方程描述具有内在的联系, 是可以相互转换的<sup>[34]</sup>. 在实际情况下, 会根据研究问题的不同, 视方便可以选取它们中的任何一种.

### 2.5 开环优化量子控制模型

人们已经发展出多种量子控制模型, 如双线性模型、Markovian 主方程、随机主方程、基于环境驱动的控制 (environment engineering) 等<sup>[2]</sup>. 一般认为构成一个量子模型的要素应包括: 1) 系统动力学的定量描述; 2) 控制手段的确定; 3) 控制任务的指标, 如图 3 所示. 在 NMR 体系上, 并不是所有的控制模型都得到了成熟的发展, 有些还处于初步的研究中. 从 NMR 量子控制发展的角度, 这里将主要介绍对于封闭系统和 Markovian 系统建立开环优化控制模型.

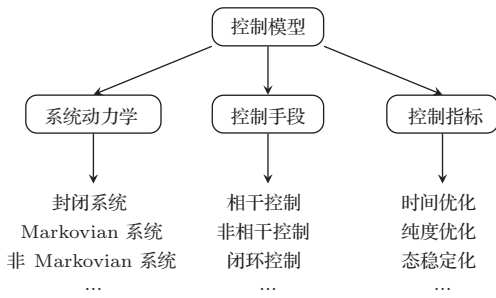


图 3 建立量子系统的控制模型所涉及到的几个要素

Fig. 3. Factors that constitute a quantum system control model.

设系统哈密顿量为  $H_S$ , 相干控制哈密顿量为

$$H_C(t) = \sum_{k=1}^m u_k(t)H_k, \quad (28)$$

其中  $\{u_k(t)\}_{k=1}^m$  表示含时控制输入变量,  $\{H_k\}_{k=1}^m$  是与控制输入耦合相应的系统算符. 该受控系统的演化遵循 Schrödinger 方程

$$|\dot{\psi}(t)\rangle = -i[H_S + \sum_{k=1}^m u_k(t)H_k]|\psi(t)\rangle, \quad (29)$$

或等价地,

$$\dot{U}(t) = -i[H_S + \sum_{k=1}^m u_k(t)H_k]U(t). \quad (30)$$

现在用几何控制的语言进一步表述上述控制系统的优化问题. 设  $G = SU(2^n)$  表示  $\mathcal{H}$  上的么正变换群,  $\{H_k\}_{k=1}^m$  为定义在  $G$  上的  $m$  个独立的右不变向量场. 那么对每个实连续向量场  $u(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_m(t))$ , 确定出  $G$  上从恒等元出发的一条轨迹. 因此, 为了将系统驱动到某个目标状态, 或换句话说, 为了实现某个目标么正变换, 就相当于找到控制函数  $u(t)$  使得系统的演化轨迹能够连接恒等元到目标变换. 因而, 有如下控制模型, 称为双线性控制系统<sup>[35,36]</sup>:

**模型 (双线性控制封闭系统)** 给定紧致联通 Lie 群  $G = SU(2^n)$ , 其 Lie 代数为  $g = su(2^n)$ , 考虑定义在  $G$  上的动力系统

$$\dot{U} = [H_d + \sum_{k=1}^m u_k(t)H_k]U, \quad (31)$$

其中  $H_d \in g, H_k \in g, u_k(t) \in \mathbb{R} (k = 1, 2, \dots, m)$ , 初始条件为  $U(0) = U_i, U_i \in G$ . 对任意  $U_f \in G$ , 找到  $\{u_k(t)\}_{k=1}^m$  使得存在时刻  $T$ , 满足  $U(T) = U_f$ .

(31) 式中  $H_d$  和  $(H_1, \dots, H_m)$  分别称为偏移项和控制方向. 显然, 系统的容许控制集至少应包含所有的分段连续函数. 优化控制问题 (31) 式可以容易地推广到开放系统的情形.

**模型 (Markovian 系统)** 考虑如下受控 Lindblad 方程

$$\dot{\rho} = [H_d + \sum_{k=1}^m u_k(t)H_k]U + \hat{R}\rho. \quad (32)$$

设初始条件为  $\rho(0) = \rho_i$ , 找到  $\{u_k(t)\}_{k=1}^m$  使得存在时刻  $T$ , 满足  $\rho(T) = \rho_f$ .

数学上, 问题 (31), (32) 的解并不惟一. 而在实际情形下, 也并不是每个解都满足要求, 因此需要定义一个评价函数来评价控制解的优劣. 这样的评价函数又称为性能指标 (performance index). 在量子信息中, 一大类控制问题都可归于这种优化控制模型. 性能指标依具体控制任务而定, 其一般形式表示为如下泛函:

$$\mathcal{J}[U(\cdot), u(\cdot)] = \mathcal{F}(U(T)) + \int_0^T \mathcal{G}(U(t), u(t))dt, \quad (33)$$

其中  $\mathcal{F}$  是定义在  $SU(2^n)$  上的连续可微函数,  $\mathcal{G}$  是定义在  $SU(2^n) \times \mathbb{R}^m$  上的连续可微函数. 若  $\mathcal{J}$  只含第一项, 则称为 Mayer 型泛函; 若其只含第二项, 则称为 Lagrange 型泛函<sup>[37,38]</sup>.

问题 (31), (32) 式可以方便地表述为约束优化问题, 即要求实现目标操作的保真度最大化,

$$\begin{aligned} \max \mathcal{J}[U(\cdot), u(\cdot)] &= F(U(T), U), \\ \text{s.t. } \dot{U} &= [\mathbf{H}_d + \sum_{k=1}^m u_k(t) \mathbf{H}_k] U. \end{aligned} \quad (34)$$

对于态制备的情形, 任务是将系统从初态  $\rho_i$  变换到与目标态  $\rho_f$  尽可能接近的末态, 因此目标泛函可以取为

$$\mathcal{F}(U(T)) = F(U(T)\rho_i U(T)^\dagger, \rho). \quad (35)$$

Lagrange 型优化控制问题包括时间极小控制

$$\min \mathcal{F}(U(\cdot), u(\cdot)) = \int_0^T 1 dt \quad (36)$$

和能量极小控制

$$\min \mathcal{F}(U(\cdot), u(\cdot)) = \int_0^T |\mathbf{u}(t)|^2 dt. \quad (37)$$

### 2.6 可控性、可达集

可控性 (controllability) 是控制理论的基本概念. 在量子体系的调控中, 它很自然地与量子计算通用性具有着紧密的联系 [39]. 人们已经发展出了几种不同的量子可控性的概念 [40,41].

**定义 1** (纯态可控性) 量子系统 (29) 称为纯态可控的: 如果对每个初态  $|\psi_i\rangle$  和末态  $|\psi_f\rangle$ , 存在控制函数  $\mathbf{u}(t) = \{u_k(t)\}$  和时间  $T$ , 使得控制模型 (29) 的相应的动力学解满足, 在初始条件  $|\psi(0)\rangle = |\psi_i\rangle$  下, 在  $T$  时刻有  $|\psi(T)\rangle = |\psi_f\rangle$ .

关于受控系统 (29) 的可控性的一个基本结论是: 如果由  $\{H_k\}_{k=1}^m$  生成的 Lie 代数  $g$  满足  $g = su(2^n)$ , 系统是纯态可控的.

**定义 2** (算符可控性) 量子系统 (30) 称为算符可控的: 如果存在控制函数  $\mathbf{u}(t) = \{u_k(t)\}$  将系统时间演化算符  $U$  从  $I$  驱动到任意目标, 么正算符  $U_f \in SU(2^n)$ .

给定控制输入  $u$  和初始点  $U_0$ , 问题 (31), (32) 在时刻  $t$  的解记作  $U(t; u, U_0)$ . 对于  $T \geq 0$ , 系统在  $T$  时刻可以达到的所有点的集合记作  $R_T(U_0)$ , 称为系统在  $T$  时刻的可达状态集. 系统在所有时刻可以达到的点的集合称为系统的可达状态集.

$$R(U_0) = \bigcup_{T \geq 0} R_T(U_0) \subset G. \quad (38)$$

显然, 如果  $R(U_0 = I) = G$ , 则系统是可控的.

## 3 NMR 系统理论简介

本部分的内容主要是介绍液体自旋 1/2 NMR 体系的系统论, 包括液体自旋系综的哈密顿量、弛豫过程、控制手段以及重要控制任务. 更详细的关于 NMR 系统动力学的介绍可以参考文献 [42—46].

### 3.1 NMR 系统的哈密顿量理论

任何真实的 NMR 样品都包括了大量的电子和原子核. 原则上整个样品的系统演化由以下含时薛定谔方程描述, 即

$$i\dot{|\psi_{\text{full}}\rangle} = -iH_{\text{full}}|\psi_{\text{full}}\rangle, \quad (39)$$

这里整体哈密顿量  $H_{\text{full}}$  包含了所有电子、原子核以及磁场之间的相互作用. 尽管上面的方程是完备的, 但实际上并无法研究这么复杂的动态方程. 为了简化问题, 在 NMR 系统中, 只考虑核自旋部分, 而电子的影响则以平均的效应包含在核自旋哈密顿量里. 这即是所谓的自旋哈密顿量假设. 因此有

$$i\dot{|\psi_{\text{spin}}\rangle} \simeq -iH_{\text{spin}}|\psi_{\text{spin}}\rangle. \quad (40)$$

从上式可以看出, 要足够好地描述核自旋的动力学行为以及实现精确的量子控制, 必须能够给出  $H_{\text{spin}}$  的具体形式. 为了方便, 以后一律简写为  $H$ . 自旋哈密顿量  $H$  由外部哈密顿量和内部哈密顿量组成. 外部哈密顿量主要有外加磁场产生, 如静磁场、射频场和梯度场. 内部哈密顿量主要包括化学位移、偶极-偶极 (DD) 耦合和 J 耦合. 由于这里主要考虑自旋数为 1/2 的情形, 所以四偶极作用可以暂时忽略. 表 1 和图 4 分别给出了核自旋哈密顿量各项的物理来源和相对量级. 我们将逐一解释其各个组成部分的物理机制及数学表示.

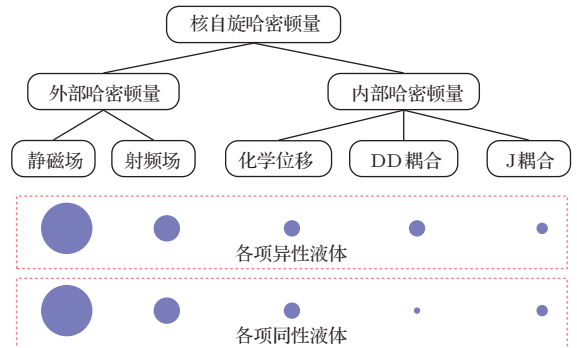


图 4 液体 (自旋 1/2) NMR 系统的哈密顿量各个组成成分以及定性的相对大小

Fig. 4. Illustration of various coupling Hamiltonians present in liquid (spin number = 1/2) NMR systems and their relative weights.



表1 液体(自旋1/2)NMR系统中存在的各种形式的哈密顿量  
Table 1. Various forms of Hamiltonian present in liquid NMR (spin-1/2) systems.

各项	类型	意义
$H^Z$	塞曼(Zeeman)	核自旋与外部静磁场的相互作用
$H^{CS}$	化学位移	核自旋与其周围的电子云诱导磁场的相互作用
$H^J$	J耦合	核自旋之间的两体相互作用, 通过化学键传递
$H^{DD}$	偶极耦合	核自旋之间的偶极磁相互作用
$H_{rf}$	射频哈密顿量	核自旋与外加的时变、相干射频场的相互作用
$H'$	随机哈密顿量	局部、随机涨落哈密顿量, 主要由分子空间自由度的热运动产生, 宏观上导致非幺正的弛豫效应
	其他哈密顿量	由其他因素(静磁场不均匀性、射频场不均匀性等)导致的哈密顿量

### 3.1.1 静磁场

静磁场  $B_0$  主要是通过超导线圈产生, 其大小保持不变. 在实验坐标系下, 一般约定静磁场  $B_0$  的方向为  $z$  轴方向. 因此静磁场可以写为  $B_0 = B_0 \hat{z}$ , 其中  $\hat{z}$  为  $z$  方向的单位矢量. 处于静磁场下的核自旋将发生塞曼分裂, 其哈密顿量为

$$H_j^Z = -\gamma_j B_0 I_z^j = -\Omega_j I_z^j, \quad (41)$$

其中  $\gamma_j$  为第  $j$  个核自旋的旋磁比,  $\Omega_j = \gamma_j B_0$  为 Larmor 频率. 由于塞曼分裂作用, 可将自旋系综 NMR 系统, 其具有两个本征能级, 记为  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$ , 其能级差为  $\Omega$ . 在液体 NMR 系统中,  $B_0$  的典型值为 (5—15) T, 核进动频率大小在几百 MHz 量级, 跟核的旋磁比成正比, 因此异核之间的 Larmor 频率相差很大. 几种常见的原子核的 Larmor 频率如表 2 所示.

表2 在 9.4 T 静磁场下的几种常见原子核的 Larmor 频率(单位为 MHz)

Table 2. Larmor frequencies (MHz) for some common nuclei under the static field (9.4 T).

核	$^1\text{H}$	$^2\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$	$^{19}\text{F}$	$^{31}\text{P}$
$\Omega/2\pi$	400	61.6	100.8	40.8	376	161.6

### 3.1.2 射频场

为实现对核自旋的主动操控, 需要引入  $x$ - $y$  平面内的射频场  $B_1(t)$  来进行激发. 若在接近 Larmor 频率附近施加以频率  $\omega_{rf}$  振荡的射频场  $B_1(t)$ , 此时

哈密顿量具有如下形式

$$H_{rf}(t) = -\sum_j \gamma_j B_1 [\cos(\omega_{rf}t + \phi) I_x^j + \sin(\omega_{rf}t + \phi) I_y^j], \quad (42)$$

其中  $B_1$ ,  $\omega_{rf}$  和  $\phi$  分别是射频场  $B_1$  的幅度、旋转频率和相位. 一般说来,  $\omega_1 = \gamma B_1$  在液体 NMR 中最大达到 50 kHz, 固体 NMR 中达到几百 kHz.

在实验室坐标系中, 要形象地描述核自旋在静磁场和射频场作用下的运动比较难. 一般会将会问题变换到绕  $z$  轴以  $\omega_{rf}$  速度旋转的旋转坐标系中去. 考虑进动频率为  $\Omega_0$  的单自旋体系, 在旋转坐标系下, 态的变换法则为

$$|\psi\rangle^{\text{rot}} = \exp(-i\omega_{rf}t I_z) |\psi\rangle, \quad (43)$$

将上式代入到 Schrödinger 方程, 可以得到旋转坐标系下的哈密顿量

$$H_{rf}^{\text{rot}} = -(\Omega_0 - \omega_{rf}) I_z - \omega_1 [I_x \cos \phi + I_y \sin \phi]. \quad (44)$$

很容易看出, 当  $\Omega_0 = \omega_{rf}$  满足共振条件时, 在旋转坐标系中自旋围绕  $B_1$  方向做章动, 其中选取相位  $\phi$  可以达到对转动轴的调制. 而当  $\Omega_0 \neq \omega_{rf}$  不满足共振条件时, 如图 5 所示. 设偏共振频差为  $\Delta\omega = \Omega_0 - \omega_{rf}$ , 则自旋绕偏离  $z$  方向  $\alpha = \arctan(\omega_1/\Delta\omega)$  的角度的轴以  $\omega'_1 = \sqrt{\Delta\omega^2 + \omega_1^2}$  的转速运动.

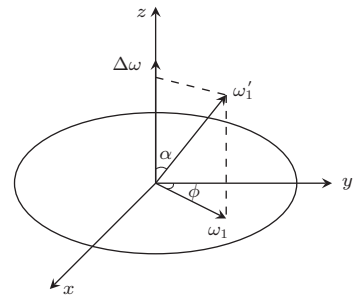


图5 非共振效应

Fig. 5. Off-resonance effect.

### 3.1.3 化学位移

在样品内, 各个核感受到的周围电子云环境是有差别的. 核周围的电子分布及运动会产生局部的磁场. 这就是化学位移的概念, 在化学上具有重要应用. 它的产生机制可看成: 外加静磁场  $B_0$  产生分子电流, 而分子电流反过来产生诱导局部磁场  $B_{\text{induced}}$ , 从而对核自旋起到一定的屏蔽作用, 如图 6 所示.

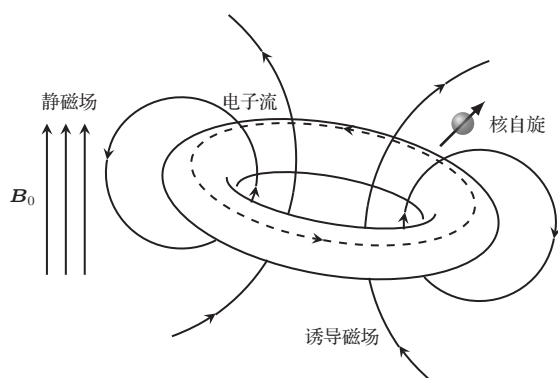


图6 化学位移产生的物理机制, 即外加静磁场  $B_0$  产生分子电流, 而分子电流反过来产生诱导局部磁场  $B_{\text{induced}}$

Fig. 6. Physical mechanism of chemical shift. The external static field  $B_0$  induces molecular electronic currents, which in turn induce local magnetic fields  $B_{\text{induced}}$ .

因此核自旋在外磁场下感受的总磁场为

$$B_{\text{loc}} = B_0 + B_{\text{induced}}. \quad (45)$$

在较好的近似程度上, 诱导场线性依赖于静磁场  $B_0$ , 有

$$B_{\text{induced}} = \sigma B_0, \quad (46)$$

其中  $\sigma$  称为化学位移张量. 典型的化学位移范围依赖于不同的原子核, 比如对  $^1\text{H}$  来说, 它的范围约为 10 ppm (百万分之一, NMR 常用的频率单位), 对  $^{13}\text{C}$  和  $^{19}\text{F}$  则约为 200 ppm. 在静磁场  $B_0$  为 10 T 时, 化学位移的值大概从几 kHz 到数十 kHz, 相比于 Larmor 频率的百 MHz 的数量级来说还是非常小的.

### 3.1.4 偶极-偶极耦合

每个核自旋可视为一个小磁体, 其周围产生的磁场依赖于该自旋的磁矩. 如图 7 所示, 两个自旋通过彼此产生的磁场相互作用, 即所谓的偶极-偶极耦合. 可以看出这种耦合形式完全通过空间直接相连, 与第三方介质无关. 所以又称偶极-偶极耦合为直接耦合. 它的相互作用可以写成

$$H_{jk}^{\text{DD}} = -\frac{\mu_0 \gamma_j \gamma_k \hbar}{4\pi r_{jk}^3} [3(I_j \cdot e_{jk})(I_k \cdot e_{jk}) - I_j \cdot I_k], \quad (47)$$

其中  $\mu_0$  是真空磁导率,  $r_{jk} = r_{jk} e_{jk}$  是连接自旋  $j$  和  $k$  的空间向量.

在高场下, 哈密顿量 (47) 式中的非久期项被平

均掉, 只有久期项被保留. 对于同核系统,

$$H_{jk}^{\text{DD}} = -\frac{\mu_0 \gamma_j \gamma_k \hbar}{8\pi r_{jk}^3} (3 \cos \Theta_{jk} - 1)(3I_{jz}I_{kz} - I_j \cdot I_k), \quad (48)$$

这里  $\cos \Theta_{jk} = e_{jk} \cdot \hat{z}$ . 对于异核系统, 可进一步简化为

$$H_{jk}^{\text{DD}} = -\frac{\mu_0 \gamma_j \gamma_k \hbar}{8\pi r_{jk}^3} (3 \cos \Theta_{jk} - 1) 2I_{jz}I_{kz}. \quad (49)$$

偶极-偶极耦合相互作用大小一般为几十 kHz 左右. 在液体 NMR 中, 不论是分子间还是分子内的偶极-偶极耦合, 由于分子的快速滚动都被平均掉了. 而在固体 NMR 中, 可以通过施加多脉冲序列或者魔角旋转技术实现类似的简单哈密顿量形式.

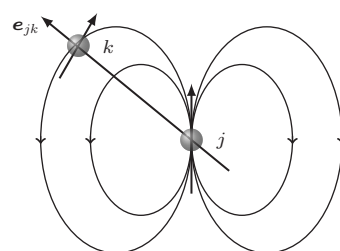


图7 偶极-偶极耦合产生的物理机制  $e_{jk}$  是平行于  $r_{jk}$  的单位矢量;  $j$  自旋产生的磁场作用于  $k$  自旋上, 反之亦然; 彼此间的相互作用产生偶极-偶极耦合

Fig. 7. Physical mechanism of dipole-dipole coupling, i.e., the magnetic interaction between the pair of spins. Here  $e_{jk}$  is a unit vector in parallel to  $r_{jk}$ .

### 3.1.5 J 耦合

J 耦合又称间接耦合, 因为这种相互作用机制来源于原子间化学键中的共享电子, 或者电子波函数的交叠产生的费米接触相互作用, 其大小依赖于相互作用的原子核种类, 并随着化学键数目的增多而减少. 在同一分子中自旋  $j$  和  $k$  的 J 耦合相互作用完全形式为

$$H_{jk}^{\text{J}} = 2\pi I_j \cdot \mathbf{J}_{jk} \cdot I_k, \quad (50)$$

其中  $\mathbf{J}_{jk}$  是 J 耦合张量. 在各向同性液体中, J 耦合张量被分子的快速翻滚运动所平均. 因而哈密顿量具有简化形式

$$H_{jk}^{\text{J}} = 2\pi J_{jk} I_j \cdot I_k. \quad (51)$$

这里  $\mathbf{J}_{jk} = (J_{jk}^{xx} + J_{jk}^{yy} + J_{jk}^{zz})/3$ , 称为各向同性 J 耦合或标量耦合常数. 而如果体系是异核情形, 则可以继续应用久期近似, 得到更简单的哈密顿量形式

$$H_{jk}^{\text{J}} = 2\pi J_{jk} I_z^j I_z^k. \quad (52)$$

J耦合有正负,可由适当的脉冲序列测定,例如二维COSY实验和一维的CNOT门序列,其绝对大小也可通过读出不同自旋的谱线劈裂来得到.典型的J耦合强度通常为几个Hz到几百Hz,例如氢氢间三键的J耦合大小约为7 Hz;碳氢间一键的J耦合大小约为135 Hz;而碳碳间一键的J耦合大小约为50 Hz.

### 3.2 弛豫过程动力学

弛豫是系统回到热平衡态的过程.首先来看热平衡态的形式.温度 $T$ 下核自旋系综的热平衡态满足Boltzmann分布,即

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{e^{-\beta H_S}}{\text{Tr}(e^{-\beta H_S})},$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$  ( $k_B$ 为Boltzmann常数), $H_S$ 为系统哈密顿量.由于在室温以及高磁场的情形有 $\|H_S\|/(k_B T) \approx 10^{-5} \ll 1$ ,故可采用高温高场近似

$$\begin{aligned} \rho_{\text{eq}} &\simeq \frac{1}{2^n} I^{\otimes n} - \beta H_S, \\ &\simeq \frac{1}{2^n} I^{\otimes n} - \frac{1}{k_B T} \sum_{k=1}^n \Omega_k I_z^k, \end{aligned} \quad (53)$$

其中第一项是最大混态部分且不产生可观测信号,第二项为极化部分.热平衡态的极化部分的强度( $\sim 10^{-5}$ )是很弱的.

弛豫过程的重要特性是,无论系统从何初态出发,在弛豫影响下最终将趋向于唯一的热平衡态.在NMR中,弛豫是通过分子的自旋自由度与空间自由度热运动之间的相互作用调制而实现的.当对样品施加外加射频场后,核自旋被激发,体系能量增加,使得分子热运动加剧.停止施加脉冲后,自旋系综相对于其热平衡态的能量增量,会通过分子空间自由度与环境热库的热交换方式也即分子热运动转移出去,直到原初的热平衡恢复,这是最基本的弛豫图像.

在最简单的现象学描述下,自旋系综的弛豫过程分为两类:布居子空间中布居数分布恢复到热平衡态的Boltzmann分布;相干子空间中相干的衰减.在该描述下,每个核的磁化强度的衰减都遵循它自己的纵向弛豫时间 $T_1$ 和横向弛豫时间 $T_2$ .因此,在纯弛豫下对第 $k$ 个核就有

$$\begin{aligned} M_x^k(t) &= M_x^k(0) e^{-t/T_2^k}, \\ M_y^k(t) &= M_y^k(0) e^{-t/T_2^k}, \end{aligned}$$

$$M_z^k(t) = M_0^k + (M_z^k(0) - M_0^k) e^{-t/T_1^k}.$$

这里 $M_0^k$ 是第 $k$ 个核热平衡态的纵向极化.显然该模型假设导致各个核各自的弛豫效应,以致发生错误的噪声相互之间是独立的,称之为Bloch弛豫模型或无关联弛豫模型.可以根据随机噪声微扰论推导出单个核自旋情形下的Bloch方程,其处理方式可以是完全经典的.

Bloch弛豫模型虽然能很好地描述许多NMR实验现象,但从系统控制的角度看,它仍然是对系统动力学过程的简化.为了更准确地刻画系统演化,我们需要将其应用于基本的开放量子系统理论,而这对控制方法的发展至关重要.

弛豫过程可视为是重要的一类开放量子系统动力学过程.根据液体NMR弛豫理论,通常做Born近似和Markovian近似.

1) Born近似:也称为弱耦合近似,即系统与环境之间的耦合足够弱,使得环境对系统的影响可以忽略.

2) Markovian近似:系统与环境的动力学行为发生在不同的时间尺度,环境要远快于系统的演化.这意味着从系统的时间尺度上来看,它感受到的环境作用是几乎完全随机的驱动噪声.这使得系统动力学呈现无记忆特性,即系统当前的运动趋势与它的过去是无关的.

在满足上述假设的情况下,系统演化可以由Lindblad方程描述.但这样的描述十分复杂,因为方程中Lindblad算子数目随着系统的大小而指数增长.幸运的是,实际上真正起作用的有效Lindblad算子数目是大大减少的.这需要考察系统-环境的各种相互作用是如何导致弛豫效应的,也就是弛豫机制的确定.只有弄清了实际系统的弛豫机制,才能对其环境的影响做出适当的假设,从而对有效Lindblad算子有更深入的认识.

对液体自旋1/2 NMR系综,处于样品不同位置的自旋感受到不同局部扰动的涨落场,这些涨落场导致了宏观的非么正效应即弛豫.局部涨落场的存在主要是由于样品分子在不停地做无规热运动,具体生成机制包括<sup>[42]</sup>:

1) 化学位移各向异性(chemical shift anisotropy) 外部磁场产生分子内电子电流,而电子电流在局部产生感应磁场,当分子发生旋转时,电子电流的局部感应磁场也随之改变;

2) 偶极-偶极耦合的涨落 当分子发生快速转动时自旋的极化保持, 但它们之间的相对空间位置发生了变化, 从而偶极-偶极相互作用也发生变化;

3) 交叉弛豫机制(cross-relaxation) 化学位移各向异性弛豫机制和偶极-偶极耦合的涨落机制均来源于分子热运动, 显然它们并不是独立的, 它们之间的关联称为交叉弛豫.

在了解体系的弛豫机制后, 我们知道含时涨落的局部微扰哈密顿量具有如下形式:

$$H'(t) = H_{CSA}(t) + H_{DD}(t) + H_{CR}(t), \quad (54)$$

其中  $H_{CSA}(t)$ ,  $H_{DD}(t)$ ,  $H_{CR}(t)$  分别代表 CSA 机制、DD 机制和 CSA-DD 交叉弛豫机制. 基于弛豫机制模型推导出系统弛豫方程, 由 Redfield 理论给出. 由于理论较复杂, 其主要内容可以参见文献 [47]. 基于 Redfield 理论导出的 Redfield 方程或 Lindblad 方程, 能较好地描述体系的弛豫动力学, 为研究弛豫过程的主动控制提供了基础.

### 3.3 开环控制手段

#### 3.3.1 相干控制: 射频脉冲

在 NMR 体系中, 射频场是最直接、可以用来实现相干控制的手段. 射频控制哈密顿量的形式可以见 (42) 式. 由于任何么正操作都可以分解为一系列单比特门和 CNOT 门操作, 我们现在来看如何应用射频场实现这些基本逻辑门.

**例 3** (单量子比特门实现) 当射频脉冲与自旋发生共振 ( $\Omega_0 = \omega_{rf}$ ) 时, 在旋转坐标系中, 由 (44) 式可知核自旋体系的时间演化算符为  $U(T) = \exp[-iH_{rf}^{rot}T] = \exp[i\omega_1(I_x \cos \phi + I_y \sin \phi)T]$ , 其中  $T$  是脉冲作用时间. 若选取  $\phi = 0^\circ$  或  $\phi = 90^\circ$ , 则演化算符对应着绕  $x$  或  $y$  轴的旋转操作. 调节时间  $T$  和强度  $\omega_1$  可以控制旋转的任意角度, 即  $\theta = \omega_1 T$ . 对于任意一个单比特的旋转变换存在实数  $\alpha, \gamma, \beta$  和  $\delta$  满足

$$U = e^{i\alpha} R_x(\beta) R_y(\gamma) R_x(\delta), \quad (55)$$

可以看出只需要有绕  $x$  和  $y$  的旋转就能实现任意的单量子比特门.

**例 4** (两量子比特门实现) 在两量子比特门的实现中, 需要用到系统内部的耦合作用. 例如在旋转坐标系中弱耦合的两自旋体系,  $J$  耦合演化为

$U_J = \exp[-i2\pi J I_z^1 I_z^2 t]$ , 即

$$U_J = \begin{bmatrix} e^{-i\pi J t/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{+i\pi J t/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{+i\pi J t/2} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi J t/2} \end{bmatrix}.$$

容易验证有等式

$$U_{CNOT} = \sqrt{i} R_z^1\left(\frac{\pi}{2}\right) R_z^2\left(\frac{\pi}{2}\right) R_x^2\left(\frac{\pi}{2}\right) \times U_J\left(\frac{1}{2J}\right) R_y^2\left(\frac{\pi}{2}\right).$$

异核之间的 Larmor 频率相差很大, 很容易实现对不同核自旋的单独操控. 而对于同核体系, 不同核自旋的单独操控可以通过它们化学位移的不同而得以实现. 因此, 为了在同核体系中对其中的某个或某些自旋进行操控, 就需要用到选择性脉冲 (又称软脉冲, 是指射频强度比较小、持续时间比较长的脉冲) 的激发. 软脉冲的强度一般在  $\gamma B_1/(2\pi) \leq \Delta F$ , 其中  $\Delta F$  为体系化学位移的整个频谱宽度 [48]. 由于其在频谱上激发的范围与  $\gamma B_1/(2\pi)$  约在同一个量级, 一般可以被用来做核自旋选择、多重态选择或单跃迁激发选择. 为了获得更好的选择性, 软脉冲一般被调制成不同的形状 (形状脉冲), 主要有纯振幅调制和纯相位调制两种类型. 常见的振幅调制的形状有高斯型 [49]、Sinc 型 [50] 和 Hermite 型 [51] 脉冲, 均可用来实现在固定频域内对自旋的激发或翻转, 其原理可以简单地这样描述: 将 NMR 系统近似地看成线性系统, 即 NMR 响应是翻转角  $\alpha$  ( $\alpha \ll 1$  rad) 的线性函数; 由线性系统响应的卷积定理, 设  $g(t)$ ,  $h(t)$  为连续函数, 以  $\mathcal{F}$  表示傅里叶变换算符, 那么有  $\mathcal{F}(g(t)h(t)) = \mathcal{F}(g(t)) * \mathcal{F}(h(t))$ , 则在输入脉冲为形状函数  $h(t)$  的情形, 系统的响应为其傅里叶变换. 所以有一个简单的准则来判断形状脉冲的选择性: 选择性脉冲的激发谱形状近似为其傅里叶变换.

**例 5** (Gaussian 线型) Gaussian 线型因其良好的选择性而具有广泛的应用, 其可以表示为

$$G(t)|_{t=0}^T = M \exp\left[-\frac{(t-T/2)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (56)$$

其中  $M, T, \sigma$  分别是线型的幅度、脉宽和方差. 一般地, Gaussian 选择性脉冲具有如下表达式

$$G(t) = (G(t) \cos(\omega_{rf}t + \phi), G(t) \sin(\omega_{rf}t + \phi)), \quad (57)$$

其中  $\omega_{\text{rf}}$ ,  $\phi$  分别是 Gaussian 型施加的照射频率和相位. 因此 Gaussian 选择性脉冲的可调制参数就包括幅度、脉宽、方差、照射频率和相位. 图 8 示意了它的脉冲形状及其傅里叶变换和激发谱.

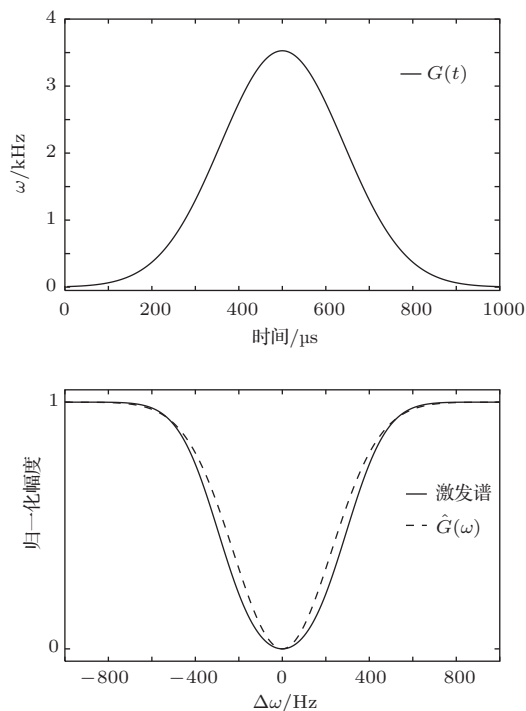


图 8 Gaussian 脉冲的线型、傅里叶变换以及其激发谱. 从图中可以看出其 Fourier 变换与激发谱的近似程度  
 Fig. 8. The Gaussian lineshape, and its Fourier transform and excitation profile. It can be seen from the figure that the Fourier transform approximately equal to the excitation profile.

这类形状脉冲在 NMR 领域有着广泛的研究, 有很多的精心设计的复杂的形状脉冲用来实现不同带宽、激发频率下的量子操控, 有些形状脉冲还能有效地抵抗实验环境的不完美性 (例如磁场的均匀性). 然而, 这些形状脉冲在对目标核进行操控的同时, 也会对其余的核产生附加的影响, 其中特别值得关注的是偏共振以及在脉冲作用时段内发生的 J 耦合演化 (详见 4.3.2 节). 因此在进行量子计算实验的过程中, 我们需要精确地掌握形状脉冲的整体作用.

**例 6** (通过单跃迁激发选择脉冲实现 CNOT 门) CNOT 门也可以通过两比特的单跃迁激发哈密顿量  $H_{\text{tm}} = \pi I_x^1(1/2 + I_z^2)$  来实现. 然而在实际实验中, 当在单跃迁共振频率 (例如  $|00\rangle \rightarrow |10\rangle$ ) 上施加一个长时间、低功率 ( $\Omega_1 \ll 2\pi J$ ) 的线选脉冲时, 实际作用在系统上的操作  $U_{\text{exp}}$  将偏离理想目标

操作  $U_{\text{tar}} = \exp[-i\pi I_x^1(1/2 + I_z^2)]$ , 能够近似为

$$U_{\text{exp}} \approx U_{\text{tar}} U_z(\alpha),$$

其中  $U_z(\alpha) = \exp(-i\alpha_1 I_z^1) \exp[-i\alpha_2 I_z^1(1/2 + I_z^2)]$  代表一系列条件相位因子. 这个结果可以推广到更多比特的系统中 [52].

设计选择性脉冲, 除了激发谱是重要的考虑因素, 还有其他特定要求需要考虑, 比如绝热脉冲系列 [53] 可消弱耦合效应的自聚焦脉冲. 更一般地, 人们可以采用数值优化的办法. 比如将振幅随时间变化的形状脉冲写成几个基本函数的合成 [54]:

$$\omega_1(t) = A_0 + \sum_n A_n \cos\left(n \frac{2\pi}{T} t\right) + B_n \sin\left(n \frac{2\pi}{T} t\right),$$

然后采用数值算法找出最优的参数, 例如退火算法、遗传算法等.

相位调制形状脉冲则是让相位随着时间变化. 例如让相位随时间线性变化  $\phi(t) = kt$ , 则可对应于激发频率为  $\omega_{\text{rf}} + k$  的脉冲:

$$H_{\text{rf}} = \omega_1 \{ \cos[(\omega_{\text{rf}} + k)t + \phi_0] I_x + \sin[(\omega_{\text{rf}} + k)t + \phi_0] I_y \}.$$

其中  $\omega_{\text{rf}}$  和  $\phi_0$  分别为脉冲的中心频率和初始相位. 可以用来同步脉冲中的 Bloch-Siegert 效应 [55].

考虑最一般的射频形状脉冲, 即  $x$ - $y$  平面上的任意时变射频场  $\mathbf{B}(t) = (B_x(t), B_y(t))$ . 此时射频哈密顿量写为

$$H_{\text{rf}}(t) = - \sum_j \gamma_j [B_x(t) I_x^j + B_y(t) I_y^j]. \quad (58)$$

量子控制的一个重要的任务就是能够让系统按照任意想要的目标操作进行演化. 原则上, 在不考虑噪声的情况下, 通过射频场就可以实现这一点. 在 NMR 量子控制 (以及量子计算) 中, 调制射频场的强度、频率和相位等元素以实现系统的主动驱动是最基本的方法. 因此, 我们又把射频场产生的哈密顿量称之为控制哈密顿量.

### 3.3.2 非相干控制: 相循环、梯度场和弛豫效应

除了射频控制以外, NMR 还提供了其他操控手段, 包括相循环、梯度场和弛豫效应. 它们的共同特征是所导致的系统演化是非么正的. 这使得我们可以研究非么正控制手段在 NMR 量子控制中的应用. 弛豫效应已在 3.2 节中介绍, 下面简要说明前两种控制手段.

在NMR中,常把密度算符按照相干阶分解,即

$$\sigma = \sum_{-p_{\max}}^{p_{\max}} \sigma^p, \quad (59)$$

其中 $p$ 为 $\sigma^p$ 的相干阶数. 射频脉冲可以改变相干阶数,而自由进动则不改变相干阶数. 图9示意了一个脉冲路线图及其相应的相干路径图. 图中对应着两条相干路径 $0 \rightarrow 1 \rightarrow -1$ 和 $0 \rightarrow -1 \rightarrow -1$ . 在量子控制中有时需要选择这些路径中的一条,即相干路径选择,这种操作是非相干的,后面会了解相位循环中实际上是一种经典的叠加. 相位循环的基本依据是:若脉冲相位改变 $\Delta\phi$ ,则这个脉冲作用下相干阶改变为 $\Delta p$ 的信号成分产生的相位变化为 $-\Delta p\Delta\phi$ . 若脉冲序列含有 $n$ 个脉冲,每个都会改变一点相位,对于一条相干路径(假设相干阶的依次变化为 $\Delta p_1, \Delta p_2, \dots, \Delta p_n$ )的总的改变相位为

$$\Phi_{\text{path}} = -\sum_i^n \Delta p_i \Delta \phi_i - \phi_{\text{rec}}, \quad (60)$$

其中 $\phi_{\text{rec}}$ 为接收相位. 一般实验进行 $m$ 组,将其结果经典累加,那么到达 $\sum_j^m e^{i\Phi_{\text{path}}^j} \neq 0$ 的相干路径得到保持, $\sum_j^m e^{i\Phi_{\text{path}}^j} = 0$ 的被抛弃. 实验中一般选取对脉冲序列中的一个脉冲的相位和接收相位做变化,遵循的一般原则可参见文献[42]. 这种非相干手段可以用于赝纯态的制备(时间平均法).

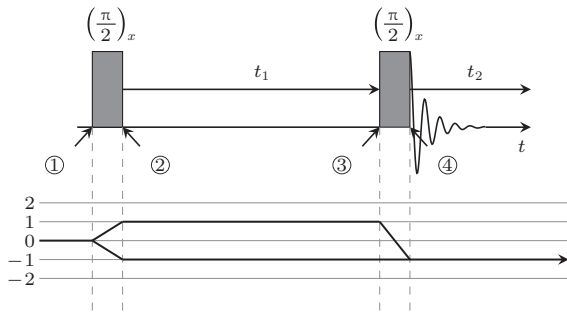


图9 图例: 脉冲路线图和对应的相干路径图  
Fig. 9. The pulse sequence and the corresponding coherence path.

NMR量子控制中,常使用到梯度场来消相干,起到散相的效果. 例如,单自旋的体系,在 $\hat{z}$ 方向加上不均匀的磁场,则 $\mathbf{B}(z, t) = \mathbf{B}_0\hat{z} + B'(t, z)\hat{z}$ ,其中取 $B'(t, z) = g(t)z$ 也即 $g(t) = \partial B_z(t)/\partial z$ (称为磁场空间梯度). 此时的哈密顿量为 $H =$

$\gamma[B_0 + g(t)z]I_z = (\omega_0 + \omega')I_z$ . 那么 $p$ 阶相干项 $\sigma^p$ 在梯度场作用下的时间演化为

$$\begin{aligned} \sigma^p(t) &= \exp(-iHt)\sigma^p \exp(iHt) \\ &= \exp\left[-ip\left(\omega t + \int \gamma g(t)z dt\right)\right]\sigma^p. \end{aligned} \quad (61)$$

若 $g(t) = g$ 不随时间变化,可得 $\sigma^p(t) = \exp[-ip(\omega t + \gamma g z t)]\sigma^p$ . 由于NMR体系是系综,需考虑空间平均,即对 $\hat{z}$ 方向进行积分,则可以得出

$$\langle \sigma^p(t) \rangle = \sigma^p \delta_{p,0}. \quad (62)$$

可以看出,除了 $p = 0$ 阶项,其他相干项全部消除,该过程显然是非相干的. 赝纯态制备的空间平均法使用了这种非相干手段. 也可以利用“梯度回波(gradient echo)”技术[56]选择性地消除某些自旋上的相干. 另外梯度场可以代替相位循环实现相干路径选择[42].

### 3.4 闭环控制手段: 辐射阻尼效应

辐射阻尼(radiation damping)效应是NMR体系中存在的一种基本作用机制. 早在1954年, Bloembergen[57]就在他的研究中分析了作用于自旋进动的多种阻尼机制,接着包含辐射阻尼的磁化动力学理论就被建立起来并在实验[58]上得到了验证. 早期人们普遍认为辐射阻尼效应对于NMR体系的控制是不利的,于是发展了很多方法去压制它. 而近年来辐射阻尼效应被重新发掘,作为一种闭环控制手段应用到了自旋体系的操控中.

辐射阻尼效应[59]是高场NMR体系中仅在特定频域发生的现象. 在测量过程中,核自旋绕着外加静磁场发生进动,在探测线圈中产生了震荡的电流,从而产生电磁场作用于样品上,便在系统的测量中产生了一个反馈效应. 在某些频域,辐射阻尼信号太弱,以至于完全被弛豫效应所淹没,在其他的一些特定频域如含有丰富自旋溶剂的频域中,辐射阻尼效应就能与弛豫效应相当甚至超过它. 由探测线圈产生的宏观辐射阻尼场的表达式可以写为[60]:

$$\mathbf{B}_{\text{rd}}(t) = \frac{1}{\gamma T_{\text{rd}}} \begin{pmatrix} -\langle M_y(t) \rangle \\ \langle M_x(t) \rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (63)$$

其中 $T_{\text{rd}}$ 称作辐射阻尼特征时间,并且

$$T_{\text{rd}} = \frac{2}{\gamma \mu_0 f Q M_0}, \quad (64)$$

上式中  $\mu_0$  表示真空磁导率,  $f$  表示线圈的填充系数,  $Q$  表示线圈的品质因子. 显然辐射阻尼场依赖于系统当前所处的状态. 如果对辐射阻尼场加以调制, 就可以生成反馈作用场

$$\mathbf{B}_{fb} = e^{-i\varphi} \mathbf{B}_{rd}, \quad (65)$$

其中  $\varphi$  是反馈控制场与辐射阻尼场的相对相位. 辐射阻尼与反馈场的几何图像见图 10 (a). 将反馈控制场加入到特定控制模型中, 就能将实时反馈控制的方法应用到具体的 NMR 体系控制任务中.

可以将基于辐射阻尼效应的反馈控制场与系统弛豫效应进行比较. 反馈控制场是宏观的经典场, 因此它对体系的影响是幺正的. 图 10 (b) 体现出系统的演化路径在辐射阻尼效应和在弛豫效应的驱动下的本质不同 [60].

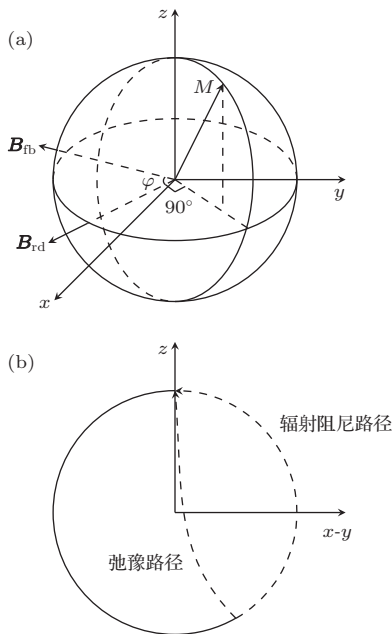


图 10 (a) 辐射阻尼场的几何图示; (b) 辐射阻尼效应与弛豫效应导致的演化路径对比

Fig. 10. (a) Geometric illustration of radiation damping field; (b) comparison of the evolution pathway lead by radiation damping and relaxation effects.

### 3.5 自旋系综的重要控制任务

#### 3.5.1 脉冲设计

在传统 NMR 谱学和 NMR 量子控制中, 脉冲设计都是十分重要的任务. 在脉冲设计过程中, 人们需要考虑很多实际因素, 包括 1) 静磁场的非均匀性; 2) 控制不完美性, 这可能是源于脉冲发生器未能生成理想的脉冲波形, 也可能是实际样品体系各处感受到的射频场的差异; 3) 系统内部结构的

不确定性, 比如在温度不稳定的情况下, 液晶样品的哈密顿量发生变化; 4) 弛豫过程引起的退相干效应; 5) 脉冲设计的复杂度问题. 为了克服这些问题, 传统 NMR 谱学已经积累了大量的研究. 然而随着量子控制领域的发展, 人们能够更明确地理解所要考虑的控制模型, 从而有利于更加有效地设计出优化而精确的脉冲控制.

#### 3.5.2 绝热量子模拟和绝热量子计算

在 1928 年, Born 和 Fock [61] 提出了量子绝热定理: 假设哈密顿量各本征态间存在能隙, 如果系统在  $t = 0$  时处于初始哈密顿量  $H(0)$  中的某一个本征态, 令为  $|n(0)\rangle$ , 则当系统改变的足够缓慢时, 即满足绝热条件

$$|\langle n(t)|\dot{m}(t)\rangle/[\varepsilon_n(t) - \varepsilon_m(t)]| \ll 1, \quad (66)$$

其中  $m \neq n$ , 系统在  $t$  时刻后依然保持在瞬时哈密顿量  $H(t)$  所对应的第  $n$  个瞬时本征态  $|n(t)\rangle$  上.

量子绝热定理被应用于量子计算中 (绝热量子计算模式) [62], 与上面介绍的量子电路计算模式有本质的区别, 其主要利用绝热量子演化原理进行计算, 关键点是绝热产生目标哈密顿量, 它的基态编码了所研究问题的输出. 因此, 如何精确地实现到达目标哈密顿量的绝热路径演化是量子控制在绝热量子计算中的主要任务. 具体地, 在  $t = 0$  时刻, 系统开始于一个合适的初始哈密顿量  $H_0$  的基态  $|\psi_g(0)\rangle$ , 缓慢地改变系统的哈密顿量使得在  $t = T$  时刻到达目标哈密顿量  $H_P$ :

$$H(t) = [1 - s(t)]H_0 + s(t)H_P, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (67)$$

这里控制函数  $s(t)$  满足  $s(0) = 0$  到  $s(T) = 1$ , 通过测量  $H(T)$  的基态  $|\psi_g(T)\rangle$ , 就获得了所研究问题的解. 整个过程需要满足两个条件: 1) 基态与第一激发态间的能隙不为零; 2)  $s(t)$  (即含时哈密顿量) 足够缓慢地变化, 使得满足绝热条件 (67). 为了获得问题的解, 系统需要在  $t = T$  时刻依然保持在  $H(T) = H_P$  的基态  $|\psi_g(T)\rangle$ , 因此, 一旦  $H_0$  和  $H_P$  被确定,  $s(t)$  路径的设计就是绝热量子计算中至关重要的控制问题. 最直接的方法是线性插值  $H_t$ , 即  $s(t) = t/T$ , 然而这种方法效率极低, 绝热的时间非常长, 导致很多实验无法进行. 因此, 对于特定的问题, 我们能够对绝热扫描函数  $s(t)$  进行优化, 使得绝热效果最佳.

已有理论证明, 在计算复杂性上, 绝热量子计算和传统的量子计算具有等价性<sup>[63]</sup>. 绝热量子计算特别适合处理组合优化问题, 已经发展出的绝热量子算法包括 3-SAT 算法<sup>[62,64]</sup>、未分类的数据库搜索算法<sup>[65]</sup>和大数质因子分解问题<sup>[66]</sup>等已用于解决经典的优化问题. 一些小规模的量子绝热算法在 NMR 系统已被实验实现<sup>[67-69]</sup>, 包括绝热大数质因子分解 21<sup>[66]</sup>和目前最大的数 143<sup>[70]</sup>. 由于绝热量子计算具有十分突出的抗退相干能力和强的容错能力, 因此有着重要的应用前景. 另一方面, 一些绝热量子算法的时间标度行为仍是不完全清楚的, 特别是对非确定性多项式 (NP) 完全问题<sup>[71]</sup>. 在对某些特定的例子进行的数值分析中发现, 一些例子呈指数复杂性的时间标度<sup>[72]</sup>, 而另一些例子呈多项式复杂性的时间标度<sup>[62,73]</sup>. 但对于 NP 完全问题, 人们一直认为在最坏情况下是指数复杂性的<sup>[74]</sup>.

量子绝热的控制手段在量子模拟中也得到了广泛应用. 1982 年, Feynman<sup>[5]</sup>提出了基于量子力学原理构建的计算机可以有效地模拟复杂的量子系统, 完成经典计算机无法胜任的难题. 量子绝热控制非常合适研究多体复杂量子体系的基态行为, 如量子相变<sup>[67,75-77]</sup> (发生在绝对零度的相变现象, 它的发生代表着在量子多体系统中基态性质随着外部参数的连续变化发生突然的骤变). 量子绝热演化也能用于一些初态制备中<sup>[15,16]</sup>.

### 3.5.3 赝纯态制备

量子计算一般要求将所有的计算量子比特制备到一个合适的初态, 通常为基态. 然而, 室温下 NMR 自旋体系处于热平衡态, 即 (53) 式, 是一个高度的混和态, 不适合作为量子计算的初态. 最直接的方式是通过降低温度将体系冷却到它们的能量基态, 但是在液态 NMR 中这种方法是不可实际的, 因为与热能相比, Zeeman 能级分裂太小, 绝对零度将冻结液态样品. 代替产生一个纯的基态, 1997 年 Gershenfeld 和 Chuang<sup>[78]</sup>引入了赝纯态 (pseudo-pure states or effective pure states) 的概念, 赝纯态的提出使得液态分子 NMR 量子计算成为可能. 对于  $n$  比特体系, 赝纯态具有如下形式的密度矩阵:

$$\begin{aligned} \rho_{\text{pps}} &= (1 - \eta)I/2^n + \rho_{\Delta} \\ &= (1 - \eta)I/2^n + \eta|\psi\rangle\langle\psi|, \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad (68) \end{aligned}$$

其中极化因子  $\eta$  又称为赝纯态的有效纯度. 可以看出, 除了极化因子  $\eta$ , 偏移密度矩阵  $\rho_{\Delta}$  的演化规律 (任何么正变换) 和观测效应完全等价于纯态  $|\psi\rangle$ . 因此, 高度混和的赝纯态能作为 NMR 系统量子计算的基准初态. 由于  $\rho_{\text{pps}}$  和  $\rho_{\text{eq}}$  的本征值不同, 从  $\rho_{\text{eq}}$  到  $\rho_{\text{pps}}$  的制备过程需要包含非相干操作. 至今, 人们已经提出了多种不同的制备赝纯态的方法, 如逻辑标记法<sup>[78]</sup>、时间平均法<sup>[79]</sup>以及空间平均法<sup>[80]</sup>.

**例 7 (空间平均法)** 两比特赝纯态制备的基本步骤如下:

$$\begin{aligned} &I_z^1 + I_z^2 \\ R_x^1\left(\frac{\pi}{3}\right) : &\rightarrow \frac{1}{2}I_z^1 - \frac{\sqrt{3}}{2}I_y^1 + I_z^2 \\ \text{grad}_z : &\rightarrow \frac{1}{2}I_z^1 + I_z^2 \\ R_x^2\left(\frac{\pi}{4}\right) : &\rightarrow \frac{1}{2}I_z^1 + \frac{\sqrt{2}}{2}I_z^2 - \frac{\sqrt{2}}{2}I_y^2 \\ 1/2J : &\rightarrow \frac{1}{2}I_z^1 + \frac{\sqrt{2}}{2}I_z^2 + \frac{\sqrt{2}}{2}I_z^1I_x^2 \\ R_x^2\left(-\frac{\pi}{4}\right) : &\rightarrow \frac{1}{2}I_z^1 + \frac{\sqrt{2}}{2}I_z^1I_x^2 + \frac{1}{2}I_z^2 \\ &\quad - \frac{1}{2}I_x^2 + \frac{1}{2}I_z^1I_z^2 \\ \text{grad}_z : &\rightarrow \frac{1}{2}I_z^1 + \frac{1}{2}I_z^2 + \frac{1}{2}I_z^1I_z^2 \end{aligned}$$

其中  $\text{grad}_z$  表示  $z$  方向的梯度场. 这里梯度场非相干作用用来消除产生的非对角项.

赝纯态制备问题就是从热平衡态制备到赝纯态, 其中所关心的重要指标是赝纯态的有效纯度. 在室温下, 热平衡态 (53) 式的极化强度是很低的. 原则上可以通过提高核自旋的极化度以接近真正的纯态. 大多数其他固态方案中, 能够直接通过冷却技术来提高体系的极化度. 在固态 NMR 中, 核自旋可达到接近 1 的极化度. 另外一些提高极化度的方法包括: 算法冷却 (algorithmic cooling)<sup>[81,82]</sup>、光泵技术 (optical pumping)<sup>[83]</sup>、动态核极化 (dynamic nuclear polarization)<sup>[84]</sup> 和化学诱导动态核极化 (chemically induced dynamic nuclear polarization)<sup>[85]</sup>.

最近, 我们提出了一种新的制备赝纯态的方法<sup>[86]</sup>, 该方法的核心思想是利用弛豫效应实现赝纯态制备所必需的非么正操作. 以两比特的系统为例, 赝纯态 (68) 式可以写成这样的形式:  $\rho_{\text{pps}} = II/4 + \eta/4(ZI + IZ + ZZ)$ , 即三个纵向分



量相等, 于是可以设计一个“系数平均化过程”. 我们对样品施加周期性脉冲  $[\tau - V]_m$ , 这里  $\tau$  表示自由弛豫演化,  $V$  是系统密度矩阵对角元的轮换操作, 即  $V : \rho = II/4 + x_1ZI + x_2IZ + x_3ZZ \rightarrow \rho = II/4 + x_2ZI + x_3IZ + x_1ZZ$ ,  $m$  是序列的周期数. 在弛豫调制和  $V$  轮换对密度矩阵纵向分量的不断作用下, 最终系统趋向于一个周期性的稳态, 这个稳态近似满足赝纯态 (68) 式的形式. 在 Bruker Avance III 400 MHz 谱仪上, 应用该方法制备氯仿赝纯态, 实验结果得到的有效纯度  $\eta \approx 7.48\varepsilon_C$ , 其中  $\varepsilon_C$  为碳核的热平衡极化. 而通常的空间平均法达到的有效纯度  $\eta \approx 6.12\varepsilon_C$ . 该结果表明相比于空间平均法, 弛豫方法能达到更高的有效纯度, 从而显示出弛豫控制手段具有重要的利用价值.

### 3.5.4 极化转移

极化转移 (polarization transfer) 即在核与核之间进行极化传递, 是 NMR 中的基本技术 [87]. 其主要应用为, 将极化度高的核的极化转移到极化度低的核, 以增强一些不灵敏核的灵敏度、增大信息量, 从而实现更好的观测.

**例 8** (极化转移增强不灵敏核技术 (INEPT) [87]) 考虑弱耦合、异核、两比特 C-H 系统, 其热平衡态的形式为

$$\rho_{\text{eq}} \propto \gamma_C ZI + \gamma_H IZ.$$

通过如下 INEPT 脉冲序列

$$R_y^H(90^\circ) - \frac{1}{2J} - R_x^H(90^\circ) - R_y^C(90^\circ) - \frac{1}{2J},$$

可实现从 H 核到 C 核极化转移, 使得 C 核信号的提升为  $\gamma_H/\gamma_C \approx 4$  倍.

可以进一步把极化转移的问题模型化. 在更一般的意义上, 人们考虑: 在系统密度算符 Liouville 空间中, 如何通过容许控制操作, 实现系统状态从一个态矢 (极化) 方向到另一个态矢 (极化) 方向的转移. 在实际应用中, 所关心的最重要的问题就是设计实验方案, 尽可能地提高极化转移效率, 如图 11 所示.

在封闭系统控制的情形, 极化转移效率问题已经有了较充分的结论, 即由所谓的自旋动力学通用界 (universal bound on spin dynamics) [88-90] 的概念刻画. 具体而言, 自旋动力通用界指的是 Liouville 空间中, 对于给定初始状态和目标极化方向, 通过么正变换能达到的极化转移效率的界.

考虑  $N$  维量子系统, 设  $\rho$  和  $\sigma$  为 Liouville 空间中给定的密度算符. 对于任意  $U \in SU(N)$ , 总可以做如下正交分解:

$$U\rho U^\dagger = \eta\sigma + \varsigma, \quad \text{Tr}(\sigma^\dagger\varsigma) = 0. \quad (69)$$

易知

$$\eta = \frac{\text{Tr}(U\rho U^\dagger\sigma)}{\text{Tr}(\sigma^2)}.$$

极化转移效率问题相当于确定  $\eta$  可达的范围.

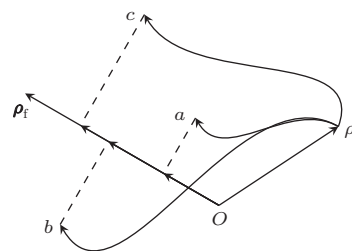


图 11 极化转移问题示意图 在  $N$  维 Bloch 空间中, 原点  $O$  为  $J/N$ , 系统状态由 Bloch 空间中的矢量表示; 对于任意初态  $\rho$ , 设极化转移的目标方向为  $\sigma$ , 不同的控制输入导致不同的演化轨迹  $a, b, c$ , 产生不同的极化转移效率

Fig. 11. Illustration of the polarization transfer problem. In  $N$ -dimensional Bloch space, the origin is the maximally mixed state  $J/N$ , and the system state is represented by a vector. For any initial state  $\rho$ , suppose the target direction of polarization transfer is along  $\sigma$ , then different controls lead to different final state which results in different polarization transfer efficiency.

**命题** (自旋动力学通用界 [88,89]) 设密度算符  $\rho$  和  $\sigma$  的本征值向量按照降序排列分别为

$$\lambda^\rho : \lambda_1^\rho \geq \lambda_2^\rho \geq \dots \geq \lambda_N^\rho,$$

$$\lambda^\sigma : \lambda_1^\sigma \geq \lambda_2^\sigma \geq \dots \geq \lambda_N^\sigma.$$

则从自旋态  $\rho$  到  $\sigma$  的极化转移效率的界为

$$\eta_{\text{max}} = \max_{U \in SU(N)} \left[ \frac{\text{Tr}(U\rho U^\dagger\sigma)}{\text{Tr}(\sigma^2)} \right] = \frac{\sum_{i=1}^N \lambda_i^\rho \lambda_i^\sigma}{\sum_{i=1}^N (\lambda_i^\sigma)^2}, \quad (70)$$

$$\eta_{\text{min}} = \min_{U \in SU(N)} \left[ \frac{\text{Tr}(U\rho U^\dagger\sigma)}{\text{Tr}(\sigma^2)} \right] = \frac{\sum_{i=1}^N \lambda_{N-i+1}^\rho \lambda_i^\sigma}{\sum_{i=1}^N (\lambda_i^\sigma)^2}. \quad (71)$$

这里简要给出上面命题的证明.

**证明** 设  $\rho, \sigma$  的对角化形式分别为

$$\rho = V \Lambda^\rho V^\dagger = V \begin{bmatrix} \lambda_1^\rho & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_N^\rho \end{bmatrix} V^\dagger,$$

和

$$\sigma = W \Lambda^\sigma W^\dagger = W \begin{bmatrix} \lambda_1^\sigma & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_N^\sigma \end{bmatrix} W^\dagger.$$

将上面式子代入  $\eta$  的表示公式,

$$\begin{aligned} \eta_{\max} &= \max_{U \in SU(N)} \left[ \frac{\text{Tr}(UV \Lambda^\rho V^\dagger U^\dagger W \Lambda^\sigma W^\dagger)}{\text{Tr}(\sigma^2)} \right] \\ &= \max_{U \in SU(N)} \left[ \frac{\text{Tr}(U \Lambda^\rho U^\dagger \Lambda^\sigma)}{\text{Tr}(\sigma^2)} \right] \\ &= \max_{U \in SU(N)} \left[ \frac{d(U \Lambda^\rho U^\dagger) \cdot \lambda^\sigma}{\sum_{i=1}^N (\lambda_i^\sigma)^2} \right], \end{aligned}$$

其中  $d(U \Lambda^\rho U^\dagger)$  表示  $U \Lambda^\rho U^\dagger$  的对角元向量. 根据 Schur 定理<sup>[91]</sup>, 密度矩阵在么正作用后的对角元向量可以写成其本征值向量的所有排列的凸组合, 即

$$d(U \Lambda^\rho U^\dagger) = \sum_{k=1}^{N!} \mu_k P_k \lambda^\rho,$$

其中  $\mu_k \geq 0$  且  $\sum_{k=1}^{N!} \mu_k = 1$ ,  $\{P_k\}_{k=1}^{N!}$  是  $N!$  阶置换群. 又根据重排不等式, 有  $\forall P_k$ :

$$P_k \lambda^\rho \cdot \lambda^\sigma \leq \sum_{i=1}^N \lambda_i^\rho \lambda_i^\sigma.$$

因此 (70) 式得证. 同理可得 (71) 式.

**例 9** (C-H 的极化转移通用界) 根据自旋动力学通用界公式 (70), 容易计算出对于弱耦合的异核两自旋 C-H 系统, 可提升 C 核自旋极化的上界为  $\gamma_H/\gamma_C \approx 4$ .

例 8 中利用 J 耦合演化的极化转移 INEPT 技术实现了么正操作下极化转移的上界, 而应用开放系统的控制能够达到更高的极化转移效率. 例如在稳态核 Overhauser 效应中利用交叉弛豫效应可以提升 C 核自旋极化至  $1 + \gamma_H/\gamma_C \cdot \sigma_{CH}/\rho_C$  倍, 这里

$\rho_C$  是 C 核自旋的弛豫参数,  $\sigma_{CH}$  是交叉弛豫参数. 因此, 只要系统弛豫参数满足  $\sigma_{CH}/\rho_C \geq 1 - \gamma_C/\gamma_H$ , 则开放系统的控制可使得 C 核自旋极化的提升超过自旋动力学通用界<sup>[42,86]</sup>. 这一点意味着即使系统与环境之间有耦合, 这种与外界的相互作用产生的弛豫效应并不总是降低系统纯度的, 反而有可能对于特定的控制任务达到比封闭系统控制更高的纯度.

### 3.5.5 弛豫动力系统的控制

在液体 NMR 体系中, 分子热运动是系统的环境噪声来源之一. 在较好的近似程度下, 系统的演化是满足 Redfield 弛豫理论的, 也即可以通过 Lindblad 主方程去描述. 这种(几乎)确定性的动力学过程使得精确的主动控制成为可能. 因此为了抵抗或利用弛豫效应, 就需要研究弛豫过程 Lindblad 主方程 (22) 的控制论. 具体而言, 从系统控制的角度看, 所关心的重要问题就包括:

- 1) 系统建模 建立有效的动态方程能描述系统的么正演化和弛豫过程;
- 2) 可控性分析/可达集分析 给定初态和目标态, 是否存在控制场使得系统在有限时间内能演化到目标状态; 给定时刻  $T$ , 研究在  $T$  时间内通过控制, 系统能达到的所有的态的集合;
- 3) 优化控制 如果可控性满足, 给定控制性能指标, 解析地或数值地给出控制场的解来优化性能指标;
- 4) 稳定性 分析受控动力学对系统参数不确定、控制不完美、环境噪声等的 Robust 性质.

## 4 NMR 中的量子控制理论与方法

随着不断复杂的 NMR 技术和应用的发展, 自旋动力学理论已经成为相关研究中不可缺少的一部分. 这些理论的方法常用于对复杂脉冲序列的设计、核磁共振实验的数值模拟以及对新实验的认识和理解. 下面我们主要介绍几种在 NMR 量子控制应用的理论与方法.

### 4.1 平均哈密顿量理论及其应用

在封闭量子系统中, 我们知道, 密度矩阵随时间的演化满足  $\rho(t) = U(t)\rho(0)U(t)^\dagger$ . 这里传播子

$U(t)$  满足

$$\frac{dU}{dt} = -iH(t)U(t). \quad (72)$$

当系统哈密顿量  $H(t)$  是含时的情形时, 一般不能解析获得方程 (72) 的解. 数值上, 我们可以把演化过程分成很多足够小的时间片段:  $T = \sum_{m=1}^N \tau_m$ , 而在每段时间内的哈密顿量则视为不含时的, 即  $H(t)|_{\tau_m}^{\tau_{m+1}} = H_m$  ( $m = 1, \dots, N$ ). 则传播子  $U(T)$  近似地满足

$$U(T) \simeq \prod_{m=1}^N \exp(-iH_m \tau_m). \quad (73)$$

这是在计算复杂脉冲序列的演化中常用的数值方法. 平均哈密顿量理论是要用一个不含时的有效平均哈密顿量  $\bar{H}$  来等效地刻画  $H_0, H_1, \dots, H_N$  这一系列哈密顿量的整体作用, 即

$$U(T) \simeq \exp(-i\bar{H}T). \quad (74)$$

根据 Baker-Campbell-Hausdorff 关系

$$e^A e^B = \exp\left\{A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}([A, [A, B]] + [[A, B], B]) + \dots\right\},$$

可以得到

$$\bar{H} = \bar{H}^0 + \bar{H}^1 + \bar{H}^2 + \dots, \quad (75)$$

其中

$$\begin{aligned} \bar{H}^0 &= \frac{1}{T} \{H_1 \tau_1 + \dots + H_N \tau_N\}, \\ \bar{H}^1 &= \frac{-i}{2T} \{[H_2 \tau_2, H_1 \tau_1] + [H_3 \tau_3, H_2 \tau_2] \\ &\quad + [H_3 \tau_3, H_1 \tau_1] + \dots\}, \\ \bar{H}^2 &= \dots \end{aligned} \quad (76)$$

平均哈密顿量理论是分析脉冲序列对自旋内部哈密顿量影响的常用理论方法, 如去耦脉冲技术, 在传统 NMR (特别是固体 NMR) 中, 是主要考虑消除偶极-偶极耦合或 J 耦合、取得高分辨率谱线的一种重要技术. 人们已经发展出了许多类型的去耦序列, 如连续波 (cw) 去耦、组合脉冲去耦 (WHH4<sup>[92]</sup>、MREV<sup>[93]</sup> 和 BLEW12<sup>[94]</sup>) 等. 这里基于平均哈密顿量理论来形式地理解这些序列是如何工作的.

任意一个组合脉冲去耦序列的表示如图 12 所示, 图中  $U_m$  为第  $m$  个理想射频脉冲的传播子,

$\tau_{m-1}$  为第  $m-1$  和第  $m$  个脉冲之间的自由演化间隔, 其相应的演化算子为  $\exp(-iH_S \tau_{m-1})$ , 总的时间  $T = \sum_{m=1}^N \tau_m$ , 则总的传播子为

$$U(T) = \prod_{m=1}^N \exp(-iH_S \tau_m) U_m.$$

可以将其改写为

$$U(T) = \prod_{m=1}^N U_m \prod_{m=1}^N \exp(-i\tilde{H}_{S(m)} \tau_m). \quad (77)$$

其中  $\tilde{H}_{S(k)} = U_k^\dagger \dots U_2^\dagger U_1^\dagger H_S U_k \dots U_2 U_1$ . 若取  $\prod_{m=1}^N U_m = U_N \dots U_2 U_1 = I$ , 利用平均哈密顿量理论 (76) 式, 可以得出零阶的平均哈密顿量为

$$\bar{H}^0 = \frac{1}{\tau_c} \sum_{k=1}^N \tau_k \tilde{H}_{S(k)}. \quad (78)$$

一般取零阶平均哈密顿量为想要的哈密顿量, 当循环时间  $\tau_c$  取足够短时, 高阶项被消除.

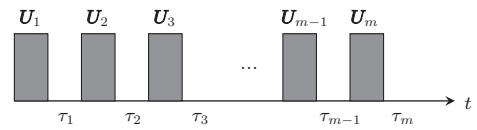


图 12 去耦序列示意图, 这里  $U_m$  均为理想硬脉冲  
Fig. 12. Illustration of decoupling sequence. Here  $U_m$  are ideal hard pulses.

### 例 10 (WAHUHA-4 去耦序列)

$$\tau \bar{X} \tau Y 2 \tau \bar{Y} \tau X \tau$$

塞曼项的变化为  $-I_z \rightarrow -I_y \rightarrow -I_x \rightarrow -I_y \rightarrow -I_z$ , 零阶效果为  $-\frac{1}{\sqrt{3}}(I_x + I_y + I_z)$ ; 对应的偶极-偶极耦合相互作用变化为:  $D_z \rightarrow D_y \rightarrow D_x \rightarrow D_y \rightarrow D_z$ , 其中  $D_\alpha = 3I_\alpha^i I_\alpha^j - I^i \cdot I^j$  ( $\alpha = x, y, z$ ), 则偶极-偶极耦合的平均零阶项为 0, 因此该序列消除了偶极-偶极相互作用. 实际中可能由于脉冲的不完美性和循环时间不能足够小, 不能完全消除高阶项, 依然保留残余的偶极-偶极耦合的影响.

在开放系统量子控制中发展的动力学去耦 (dynamic decoupling) 是用来消除环境引起退相干影响的重要手段之一. 设系统和环境整体的哈密顿量可以写为

$$H = H_S + H_B + H_{SB},$$

其中  $H_S$  是系统哈密顿量,  $H_B$  是热库的哈密顿量和  $H_{SB}$  是系统与热库的相互作用哈密顿量. 由于环境的不可控性, 利用作用在系统上的可控操作来消除环境对系统的退相干影响, 即使得系统与环境之间的相互作用  $H_{SB} \approx 0$ . 其主要思想源于传统 NMR 中自旋回波技术, 与去耦技术的主要差别在于控制的作用对象, 可用平均哈密顿量理论来分析.

**例 11** (Bang-bang 控制序列, 也即 CPMG 序列)

$$\tau X(\pi)\tau X(\pi)\tau.$$

设系统与环境之间的相互作用是相位退相干噪声, 即  $H_{SB} = \sum_i b_i I_z S_{iz}$ , 其中  $b_i$  为相互作用强度. 由于

$$\begin{aligned} X(\pi) \exp(-iH_{SB}\tau) X^\dagger(\pi) \exp(-iH_{SB}\tau) \\ = \exp[-iX(\pi)H_{SB}\tau X^\dagger(\pi)] \exp(-iH_{SB}\tau) \\ = I, \end{aligned}$$

因此有  $H_{SB} = 0$ , 系统与环境之间的相互作用被消除.

CPMG 序列作为最基本的动力学去耦序列, 在此基础上, 发展出了一系列的动力学去耦序列. 为了提高去耦效果, Uhrig<sup>[95]</sup> 设计非等间距的动力学去耦序列来消除相位退相干相互作用的高阶项; 针对更一般的相互作用形式  $H_{SB} = \sum_i a_i I_x S_{ix} + b_i I_y S_{iy} + c_i I_z S_{iz}$ , 多旋转轴的 XY-4 序列被使用<sup>[96]</sup>; 通过将基本的动力学去耦序列级联嵌套 (concatenated dynamic decoupling) 的方式进一步提高效率<sup>[97]</sup> 等.

### 4.2 几何优化控制论及其应用

假设控制哈密顿量的大小相比于系统内部哈密顿量足够大, 那么可以认为, 实现如下控制变换群中的任意元素的时间都可忽略,

$$K = \exp(\mathfrak{h}_{\{H_k\}_{k=1}^m}), \quad (79)$$

其中  $\mathfrak{h}$  是由  $\{H_k\}_{k=1}^m$  生成的 Lie 代数, 而  $K$  即是该 Lie 代数所对应的 Lie 群<sup>[98]</sup>. 进一步地, 从  $U_i$  出发, 产生任意变换  $kU_i, k \in K$  的时间也可忽略. 这说明可以把  $U_i$  到  $U_f$  的时间最优路径问题转化为寻找从陪集  $KU_i$  到  $KU_f$  的最快控制, 如图 13 所示. 在控制哈密顿量为形式 (42) 时, 显然  $K$  相当于所有单比特操作的集合.

在双线性控制系统中, Lie 群分解有着重要的应用. 对于  $n$  比特系统, 任意么正变换  $U \in SU(2^n)$  总可以分解成

$$U = \cdots U_m U_{m-1} \cdots U_1, \quad (80)$$

其中  $U_m (m = 1, 2, \dots)$  是更为简单的么正变换 (比如单比特旋转、两比特局部操作). 在量子计算中, (80) 式可以解释为实现一个量子变换的基本逻辑门序列. 因此一种寻找最优控制的途径就是, 根据目标操作的分解, 把问题约化到考虑一系列相对更简单、维数更低的么正操作的优化控制.

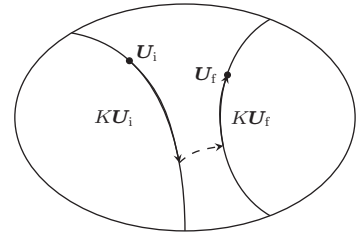


图 13  $U_i$  到  $U_f$  的时间优化路径几何图示  
Fig. 13. Geometric illustration of time optimal path from  $U_i$  to  $U_f$ .

Lie 群具有多种分解方式, 其中 Cartan 分解是最重要的一类. 应用 Cartan 分解来解决自旋系统的优化控制问题, 最早由 Khaneja 等<sup>[99]</sup> 提出, 并取得了一些重要的结果<sup>[100,101]</sup>.

对  $n$  自旋系统, 作用于其上的任意么正变换  $U \in SU(2^n)$  都具有如下 Cartan 分解

$$U = K_1 A K_2, \quad (81)$$

其中  $K_1, K_2 \in SU(2^{n-1}) \otimes SU(2^{n-1}) \otimes U(1)$ ,  $A \in \exp(\mathfrak{h})$ , 这里  $\mathfrak{h}$  是 Riemannian 对称空间的 Cartan 子代数

$$\frac{SU(2^n)}{SU(2^{n-1}) \otimes SU(2^{n-1}) \otimes U(1)}. \quad (82)$$

现在来看应用 Cartan 分解解决时间优化控制问题的最简单的例子.

**例 12** 考虑如下基于控制模型 (31) 的单比特时间优化控制问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & T, \\ \text{s.t.} \quad & \dot{U}(t) = -i[I_z + u_x(t)I_x]U(t), \\ & U(0) = I, \\ & U(T) = U_f. \end{aligned}$$

对任意  $U_f \in SU(2)$ , 存在惟一  $\beta \in [0, 2\pi]$  使得

$$U_f = \exp(-i\alpha I_x) \exp(-i\beta I_z) \exp(-i\gamma I_x), \quad (83)$$

其中  $\alpha, \gamma \in \mathbb{R}$ . 则生成  $U_f$  的时间极小控制的总时间为  $\beta$ .

### 4.3 数值优化控制

几何优化控制论成功地被应用到量子控制领域, 然而它的局限也是明显的, 最主要的一点就是在比特数超过 2 的情形要得到理论上的分析解就十分困难了. 此时需借助数值优化控制的方法去搜索想要的脉冲.

#### 4.3.1 基于梯度搜索的脉冲优化: GRAPE

基于最优化算法搜索的脉冲优化的常用技术有 Cory 等<sup>[83,102]</sup> 提出的强调制脉冲技术 (SMP) 与 Glaser 等<sup>[103]</sup> 提出的梯度上升优化方法 (gradient ascent pulse engineering: GRAPE). 由于 GRAPE 有更好的应用前景, 下面介绍 GRAPE 方法设计特定么正操作的优化脉冲的方法.

考虑封闭系统的双线性控制模型 (31). 假设目标操作为  $U_f$ , 脉冲总时间为  $T$  ( $T$  须足够长以保证在该时间内存在相应的控制场实现  $U_f$ ). 将总的演化时间平均地分为  $N$  个离散片段, 每个片段的时间为  $\Delta t = T/N$ , 在每段内射频场强度为固定值, 第  $j$  段时间内的幅度用  $u_k(j)$  表示. 那么第  $j$  段演化的传播子可以表示为

$$U_j = \exp \left\{ -i\Delta t \left[ H_S + \sum_{k=1}^m u_k(j) H_k \right] \right\},$$

从而整个脉冲对应的传播子为  $U(T) = U_N \cdots U_1$ , 其与目标操作  $U_f$  之间的保真度为

$$\Phi = F(U_f, U(T)) = \left| \text{Tr} \left( U_f^\dagger \cdot U(T) \right) \right|^2. \quad (84)$$

当  $\Phi = 1$  时, 表明该形状脉冲可以很好地实现目标操作 (至多相差整体相位).

GRAPE 算法的实质是将保真度  $\Phi$  看作参数集  $\{u_k(j)\}$  的多元函数, 从而把脉冲搜索转化为多元函数的极值优化问题. 因此算法中最重要的就是求出  $\Phi$  对于各个参数的梯度, 从而可以按照梯度的方向迭代. 经运算可知, 在一阶近似下有

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \Phi}{\partial u_k(j)} \\ &= -2\text{Re} \left[ U_f^\dagger \cdot U_N \cdots (-i\Delta t H_k) U_j \cdots U_1 \right]. \end{aligned} \quad (85)$$

基于该梯度表达式, 一个完整的梯度上升算法 (GRAPE) 的流程如下:

1) 初始化 设置参数  $u_k(j)$  的初值, 可以随机生成, 也可以一个不完美的脉冲序列参数作为初值;

2) 梯度迭代方向 对  $j = 1, \dots, N$ , 按照 (85) 式计算梯度  $g_k : g_k(j) = \partial \Phi / \partial u_k(j)$ ;

3) 迭代步长搜索 应用一维搜索算法求出上升方向的最优步长  $\bar{l} = \max_l \Phi(u_k(j) + l g_k(j))$ ;

4) 计算  $\Phi(u_k(j) + \bar{l} g_k(j))$ , 若未达到目标要求, 返回第 2) 步.

该流程的跳出条件是  $\Phi$  达到目标要求, 或是在迭代前后  $\Phi$  值的变化小于一个给定的值 (即说明已达到局部最优解).

GRAPE 算法作为基于梯度优化的算法, 原则上只能给出局部极值. 然而实践表明, GRAPE 算法具有很好的实用性, 可用于完成一些 NMR 量子计算、量子模拟实验的核心技术. 为了说明为什么 GRAPE 常常能给出很好的数值解, Rabitz 等<sup>[104-107]</sup> 在一系列文章中对态跃迁优化控制问题 (optimal control for state transition probability) 做了详细的研究, 提出了所谓的 topology of optimal control landscape, 即通过将目标函数按照控制输入参数化, 考察最大化态跃迁几率问题的局部极值的存在性. 他们发现局部极值 (或称为陷阱 trap) 是极少存在的. 在实践中, 如果参数选取得当 (比如初始脉冲值), 那么几乎不会陷入局部极大值. 他们的研究能很好地解释为什么通常的数值优化结果能找到很好的极值解.

#### 4.3.2 脉冲编译技术 (pulse compiler)

对于自旋数目较小 ( $\approx 5$ ) 的体系, GRAPE 数值程序能很好地解决脉冲搜索问题. 然而, 如果考虑更大的体系 (比如  $\geq 10$ ), GRAPE 计算所需消耗的时间与空间资源就十分可观了. 这是因为经典计算机模拟量子动力学演化的复杂度随着体系大小是成指数式增长的. 因此在这种情况下, 新的脉冲搜索技术就是十分必要的了. 对于比特数目更大的自旋体系, Laflamme 实验组<sup>[9]</sup> 发展了所谓的脉冲编译技术 (pulse compiler). 该技术已被应用于 7 bit 和 12 bit 的赝纯态制备实验<sup>[20,108]</sup>, 显示出其重要的实用价值.

脉冲编译技术所解决的问题可以如此表述: 在通常情况下, 进行一特定量子计算任务的逻辑网络可以分解为一系列单比特操作和自由 J 耦合演化的

脉冲序列, 当采用选择性形状脉冲实现各个单比特旋转时会带来局部的相位误差; 随着脉冲的增加, 这些相位误差不断集聚, 造成脉冲序列的效果远远偏离理想的情形. 为了纠正这类相位集聚的误差, 脉冲编译技术有效地追踪各个选择性脉冲产生的局部相位误差, 并加以补偿之.

举个简单的例子. 考虑一个高斯型形状脉冲, 假设激发的目标核的共振频率与其他核离得很远. 那么在施加这段形状脉冲的时间内, 虽然该形状脉冲没有激发其余的核, 但是其余的核会因为偏共振以及彼此间 J 耦合演化出不同的附加相位. 设一个  $180^\circ$  选择性形状脉冲时长为 1 ms, 对于一个偏共振频率处于 3 kHz 的核自旋, 偏共振效应导致的附加相位大约为  $15^\circ$ ; 而如果系统的 J 耦合量级为  $\sim 50$  Hz, 那么在 1 ms 的时间内所发生的 J 耦合演化同样也是不可忽略的; 即使单个选择性脉冲导致的相位误差不大, 但对于稍微复杂的脉冲序列, 其所有的相位误差仍可能集聚起来, 使得整体控制精度下降. 因此如果要精确补偿脉冲控制的相位误差, 首先就必须计算出脉冲序列中的各个局部附加相位.

现在来说明脉冲编译技术的核心思想. 考虑弱耦合自旋体系, 设施加形状脉冲  $\mathbf{H}_{\text{rf}}(t)$  的形式如下:

$$\mathbf{H}_{\text{rf}}(t) = \sum_k \mathbf{G}_k(t) [\cos(2\pi\omega_{\text{rf}}^k t + \phi_k) \mathbf{X}_k + \sin(2\pi\omega_{\text{rf}}^k t + \phi_k) \mathbf{Y}_k],$$

其中  $\mathbf{G}(t)$  为选择性脉冲线型.  $\mathbf{H}_{\text{rf}}(t)$  能同时选择性激发多个频率  $\{\omega_{\text{rf}}^k\}_k$  (或多个核). 如果各个频率的选择性足够好, 偏共振效应和 J 耦合演化所产生的附加相位能够有效地通过在脉冲前后对称地引入一组前置误差 (pre-error) 和后置误差 (post-error) 来描述, 其具体数学模型如下:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{\text{sim}} &= \mathbf{T} \left[ e^{-i \int \left( \mathbf{H}_{\text{rf}}(t) + \sum_i \omega_i Z_i + \sum_{i < j} J_{ij} Z_i Z_j \right) dt} \right] \\ &\simeq \prod_i e^{-i\alpha_i^{\text{post}} Z_i} \prod_{i < j} e^{-i\beta_{ij}^{\text{post}} Z_i Z_j} \cdot \mathbf{U}_{\text{ideal}} \\ &\quad \times \prod_i e^{-i\alpha_i^{\text{pre}} Z_i} \prod_{i < j} e^{-i\beta_{ij}^{\text{pre}} Z_i Z_j} \\ &= \mathbf{U}_{\text{post}} \mathbf{U}_{\text{ideal}} \mathbf{U}_{\text{pre}}, \end{aligned} \quad (86)$$

其中  $\mathbf{U}_{\text{sim}}$  是实际形状脉冲所对应的么正操作,  $\mathbf{T}$  是时序算符,  $\mathbf{U}_{\text{ideal}}$  是想得到的么正操作; 而  $\alpha_i^{\text{pre}}$ ,

$\alpha_i^{\text{post}}$ ,  $\beta_{i,j}^{\text{pre}}$  以及  $\beta_{i,j}^{\text{post}}$  是前置和后置误差参数 ((86) 式给出的模型能在相当好的近似程度上描述液态样品的选择性脉冲的实际效果. 但是当脉冲时间变得很长、射频强度变大或者系统哈密顿量中具有强耦合项时, 由于哈密顿量中射频部分、强耦合部分中存在的  $I_x$ ,  $I_y$  项与  $Z$  旋转和  $ZZ$  耦合演化不对易, 公式的高阶近似项变得不可忽略, 模型的描述精确度就会变差).

这种近似分解形式将前置和后置误差算符表示为绕  $Z$  旋转和  $ZZ$  耦合演化的组合, 能很好地描述脉冲的一阶、二阶近似项产生的效果. 可以应用优化算法在数值上搜索出使 (86) 式的近似程度达到最好的一组误差参数:

$$\begin{aligned} &\text{寻找 } \alpha_i^{\text{pre}}, \alpha_i^{\text{post}}, \beta_{i,j}^{\text{pre}}, \beta_{i,j}^{\text{post}}, \\ &\quad i < j, \quad i, j = 1, \dots, n \\ &\max \text{Re} \left( \text{Tr} \left[ \mathbf{U}_{\text{sim}}^\dagger \cdot \mathbf{U}_{\text{post}} \mathbf{U}_{\text{ideal}} \mathbf{U}_{\text{pre}} \right] \right) / 2^n. \end{aligned} \quad (87)$$

可以看出数值计算中所要优化的参数个数为  $2n + n(n-1) = O(n^2)$ . 因此随着比特数  $n$  的增加, 脉冲编译技术所要搜索的参数个数是多项式地增长的, 计算速度优于直接计算 GRAPE 脉冲. 对于常用的  $90^\circ$ ,  $180^\circ$  脉冲操作, 如果各个核自旋之间共振频率间距比较大, 那么大多数情况下通过脉冲编译技术能够将脉冲的保证度达到 99.5% 以上.

一旦确定出所有的误差参数, 就需要采取办法补偿它们. 这里只简单介绍消除  $Z$  旋转误差的原理. 一种方式是人为地在  $\mathbf{U}_{\text{sim}}$  前后添加  $Z$  旋转操作, 抵消掉  $Z$  前置和后置误差, 但这种方式显得有些复杂. 更好的方法是做态假设, 在实际算法执行过程中, 往往系统在某个量子门处所处的状态可能是已知的, 比如系统初态为纯态  $|0\rangle^{\otimes n}$  或最大混态  $J/N$ . 如果假定系统在目标操作  $\mathbf{U}_{\text{ideal}}$  之前 (或之后) 处于对角态, 在这种情形下, 前置 (或后置) 误差算符与系统密度算符对易, 这样就可以不必考虑它们了. 当然须注意, 在态假设的基础上, 如果只消除前置 (或后置) 误差, 那么实际所实现的就并不是真正的目标操作  $\mathbf{U}_{\text{ideal}}$ , 而关心的是目标态了.

### 例 13 (Gaussian 脉冲实现单量子比特操作)

系统为单量子比特, 其进动频率  $\Omega = 100$  Hz. 设控制目标为:  $\rho_i = Z \rightarrow \rho_f = -Y$ , 理想操作是将量子比特绕  $x$  轴旋转  $90^\circ$ . 实际施加控制为选择性 Gaussian 脉冲, 其时长为 100  $\mu\text{s}$ , 方差为 40. 图 14 中蓝色曲线表示当 Gaussian 脉冲的施加相位为  $\phi = 0$  时的系统演化轨迹, 由于系统进动, 实际末

态相比于理想末态具有后置误差  $\alpha^{\text{post}} = 36.1^\circ$ . 将 Gaussian 脉冲的施加相位按照后置误差修正后, 得到红色演化轨迹, 此时末态即是想要的理想末态.

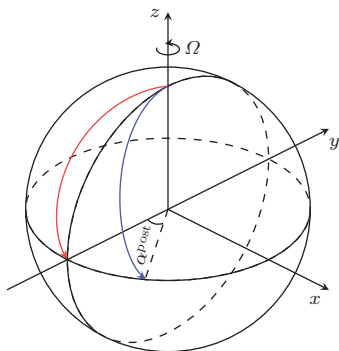


图 14 单量子比特 Gaussian 脉冲后置误差及其补偿, 这里控制目标是将比特从 Z 转到 -Y, 蓝色曲线为未修正相位误差的磁化演化轨迹, 红色曲线为修正相位误差后的磁化演化轨迹

Fig. 14. Illustration of post-error and its compensation for a Gaussian pulse applied to a single qubit. Here the task is to rotate the qubit from the north pole to -Y. Blue curve represents the evolution of the magnetization without phase calibration, red curve represents the evolution of the magnetization with phase calibration.

表 3  $C_1$  核  $90^\circ$  形状脉冲经过编译后的 pre-error 和 post-error 项. 表中的数值以角度制形式给出, 对角项给出  $\alpha_i^{\text{pre}}$  和  $\alpha_i^{\text{post}}$  项, 由于实验上将照射频率设置在  $C_1$ , 这两项数值上一样. 对角线上方给出了两两核 ( $ZZ$ ) 之间的 pre-error 项, 即  $\beta_{i,j}^{\text{pre}}$  项. 对角线下方给出了两两核 ( $ZZ$ ) 之间的 post-error 项, 即  $\beta_{i,j}^{\text{post}}$  项. 由于选择的形状脉冲时间段, J 耦合的演化时间少, 所以  $ZZ$  误差项小

Table 3. An instance of the pre-errors and post-errors for a  $90^\circ$  shaped pulse acting on  $C_1$ . The values on the diagonal line are  $\alpha_i^{\text{pre}}$  and  $\alpha_i^{\text{post}}$  (here since the rf pulse is on resonance with  $C_1$ , so  $\alpha_i^{\text{pre}} = \alpha_i^{\text{post}}$ ). The values above the diagonal line give the pre-errors  $\beta_{i,j}^{\text{pre}}$ , and the values below the diagonal line give the post-errors  $\beta_{i,j}^{\text{post}}$ . The  $ZZ$  phase errors are relatively small since the duration of the shaped pulse is small.

	M	H <sub>1</sub>	H <sub>2</sub>	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>
M	0.00	0.01	0.00	0.26	-0.01	0.01	0.00
H <sub>1</sub>	0.01	-16.14	0.03	0.00	0.29	-0.01	0.01
H <sub>2</sub>	0.00	0.03	-16.13	0.00	0.00	0.29	0.01
C <sub>1</sub>	0.26	0.00	0.00	0.00	0.09	0.01	0.02
C <sub>2</sub>	-0.01	0.29	0.00	0.09	11.58	0.13	0.00
C <sub>3</sub>	0.01	-0.01	0.29	0.01	0.13	-24.53	0.13
C <sub>4</sub>	0.00	0.01	0.01	0.02	0.00	0.13	-5.89

在多比特系统中用基本形状脉冲实现单量子比特操作将会出现更复杂的情况. 表 3 给出了

850M NMR 谱仪上基于  $^{13}\text{C}$  标记的 Crotonic 的 7 量子比特样品中 Gaussian 脉冲实现  $C_1$  核  $90^\circ$  旋转操作产生的各相位误差项的一个例子. 表 3 给的是其中一个特定脉冲的各相位误差项的例子. 该例子显示, 使用基本形状脉冲来实现单个核的旋转操作, 如果不做相位误差补偿, 其门保真度和态保真度都是较低的, 而做相位修正后态保真度基本上可以达到  $\sim 99.9\%$ .

#### 4.4 NMR 体系的闭环控制

在 NMR 中, 开环的量子控制已经在一些简单的体系中取得了很大的成功, 然而在更复杂的量子控制任务中, 开环控制受到了很多限制, 例如体系的哈密顿量往往并不是完全清楚的、控制参数控制的不完美性、仪器的噪声、环境的扰动、其他的一些不确定因素以及体系维度变得很大薛定谔方程无法准确求解等. 为了克服这些困难, 人们在实验中引入了闭环控制策略来实现对复杂量子体系的控制, 这给量子控制领域的发展带来了重要的革新<sup>[109]</sup>. 按照控制设计思想的不同, 可以将闭环控制分为闭环学习控制 (closed-loop learning control) 和量子反馈控制 (quantum feedback control)<sup>[2]</sup>. 闭环学习控制中的每一次循环都是在一个新的个体上执行的, 从而避免了测量对于系统初值的影响. 而实时反馈控制中整个控制过程都执行在同一个个体上, 并且测量将对系统演化产生显著的影响, 因而它们具有本质的区别<sup>[4]</sup>.

##### 4.4.1 闭环学习控制

闭环学习控制最早由 Judson 和 Rabitz<sup>[110]</sup> 提出, 并在化学反应实验上实现. 闭环学习控制一般由三个要素组成: 1) 初始的输入, 可以是精心设计的输入, 也可以是随机输入; 2) 实验室中产生作用于系统的一系列控制和测量它所引起的实验结果; 3) 特定的学习算法, 即根据前一个实验测量结果决定下个循环的控制输入. 如此循环直至达到目标状态. 好的学习算法应该是对初值不敏感的, 即初值的选择不会很大程度上影响算法的收敛效率和优化效果. 常用的学习算法是进化算法<sup>[111]</sup> (evolution algorithms), 这一算法又包括遗传算法 (genetic algorithms) 和进化策略 (evolution strategies) 等.

闭环学习策略与控制系统的模型无关, 且对存在于实验过程中的不可预知的噪声和扰动, 无论是

模型本身的、测量仪器具有的还是环境造成的,也都有着很好的适应性,因为学习算法只根据控制作用后的实际效果来判断控制方案的好坏,而噪声和扰动的作用已在测量的结果中体现出来了.另外,它还具有对多个独立量子系统进行控制的能力,且可以很快的速率来转换控制场.正是由于闭环学习控制具有上述诸多的优势,它已被广泛地用于各种实验中<sup>[4]</sup>,如飞秒脉冲整形技术、光学体系物理化学现象的控制、软X射线相干控制、原子中多光子的转化、分子中的电子激发等.但是,目前NMR体系中的闭环学习控制还研究得比较少,仍然是前沿问题之一.

#### 4.4.2 量子反馈控制

早在1983年<sup>[112]</sup>就提出了量子系统的反馈控制概念,而量子反馈限定基本理论在1994年由Wiseman和Milburn提出,并实现了对光电流进行瞬时的反馈控制<sup>[113,114]</sup>.量子反馈控制主要包括两个关键步骤:获得系统的信息以及根据这个信息建立有效的实时反馈系统来制定相应控制函数的调整策略作用到系统上.在经典控制理论中,反馈控制是一个有效的策略,能够弥补不可预知的扰动对控制系统的影响,或当系统初始状态未知时使其可能成为自动控制的系统.然而,经典反馈控制论并不能直接应用到量子系统中,这是因为通过量子测量获得量子系统的信息时,不可避免地干扰了量子体系的本身状态.因此,在量子反馈控制策略中,必须考虑量子测量对量子系统演化的影响.测量的结果产生经典的控制信息驱动合适的控制器与被控制的量子系统直接作用.被控制的系统是量子的,而控制器可以是量子、经典或者量子/经典的杂化系统.在量子反馈控制中有两种测量量子态的方式:投影测量和连续弱测量<sup>[115]</sup>.弱测量使得在测量过程中尽可能对被控系统不产生干扰.实际上,投影测量是连续弱测量在测量强度无限大时的极限情形.投影测量的反馈模型已经被应用于减少激光噪声以及量子比特、量子纠缠的控制和量子纠错等许多物理问题.通过弱测量的方式,实验上实现了两个量子比特的纠缠的反馈制备、光学极化量子比特的反馈控制以及非线性系统的反馈控制等.另外还有一类没有测量的相干量子反馈控制(coherent feedback control)策略,其中不含有经典测量产生的信号,使用另一个量子系统作为控制器,反馈循环中的控制操作通过直接与被控制量子

系统相互作用的么正变换来实现.由于在相干量子反馈控制中使用了体系的全部量子信息,因此能够完成经典信息反馈控制器不能完成的任务,同时避免了由于量子测量带来的不可避免的噪声.相干量子反馈控制已经被应用到光学体系中<sup>[115]</sup>,如光场的压缩相干控制等.在量子尺度操控系统的动力学理论和实验都充满了许多挑战,还有许多问题需要进一步解决.

辐射阻尼效应是NMR上实现基于测量利用经典信息进行量子反馈控制的较为直接的方法.基于辐射阻尼效应的反馈控制实验上实现了诸如加速回到热平衡态<sup>[116]</sup>、增强磁共振成像(magnetic resonance imaging)中图像对比度<sup>[117,118]</sup>等应用,同时也提出了一些实现实时量子反馈控制的实验方案<sup>[119]</sup>.下面以加速回到热平衡态为例,简要地说明辐射阻尼效应在NMR体系的实时反馈控制中所起的作用.

辐射阻尼场和自旋相互作用可用如下Bloch方程描述<sup>[116]</sup>:

$$\begin{aligned}\frac{\partial M_x}{\partial t} &= \frac{1}{T_{rd}}(-M_x M_z \cos \varphi - M_y M_z \sin \varphi) - \frac{M_x}{T_2}, \\ \frac{\partial M_y}{\partial t} &= \frac{1}{T_{rd}}(M_x M_z \sin \varphi - M_y M_z \cos \varphi) - \frac{M_y}{T_2}, \\ \frac{\partial M_z}{\partial t} &= \frac{1}{T_{rd}}(M_x^2 + M_y^2) \cos \varphi + \frac{1 - M_z}{T_1},\end{aligned}$$

这里同时也考虑了横向弛豫 $T_2$ 与纵向弛豫 $T_1$ 的作用; $M_x, M_y, M_z$ 是归一化的磁化矢量强度;辐射阻尼效应的强度由它的特征时间 $T_{rd}$ 来表征; $\varphi$ 是辐射阻尼场关于磁化矢量的相对相位,可由楞次定理决定(一般 $\varphi = 0$ ).通过这一方程的求解,便可以清楚地看到辐射阻尼效应在加速回到热平衡态中所起的作用,例如当 $T_{rd} \ll T_1, T_2$ 时,磁化矢量将按图10所示的辐射阻尼路径以 $T_{rd}$ 为特征时间回到 $z$ 方向.由(64)式可知,通过改变探头线圈的品质因子 $Q$ 可以改变辐射阻尼场的强度.因此,Huang等<sup>[116]</sup>在实验中设计了一个外加反馈电路,通过探测自旋的自由衰减(free-induction decay)信号来调节线圈的品质因子 $Q$ ,以加强辐射阻尼场使磁化矢量以比弛豫时间 $T_1$ 更快的速度回到 $z$ 方向.这一技术对于磁共振成像的进一步发展有着重要的意义.

## 5 展 望

本文从控制论的语言描述了NMR核自旋体系的控制模型与方法,给出了基于NMR的量子控制



方面研究的基本图景. 然而这里的介绍并不能完全涵盖近些年来人们在相关领域已取得的成果. 对于自旋系综的主动调控, 尽管已经取得了很重要的进展, 但我们相信仍然还有大量的控制问题有待进一步研究. NMR中的量子控制涉及到NMR谱学、量子控制、量子信息等领域. 一方面, 我们可以看到, NMR量子计算在促进传统NMR谱学和量子信息处理之间技术转移的潜在作用. 来自量子信息方面大量的理论与实际问题不断地提出新的研究课题, 例如, 已经证明复杂的幺正变换能够在实验中非常简单直接地实现, 进一步思考混态量子计算模式和纠缠在量子计算中的作用以及弛豫机制对开放量子系统控制的影响等问题. 另一方面, NMR体系中发展出来的量子控制方法(例如形状脉冲、GRAPE程序、Compiler技术等)也可以延伸应用到其他物理体系中去. 这个过程已经在一些其他物理系统(比如囚禁 Bose-Einstein 凝聚动力系统<sup>[120]</sup>、金刚石 NV 色心<sup>[121]</sup>、耦合 Josephson qubits<sup>[122]</sup>等)开始.

虽然许多经典控制的思想已经被应用和延伸到量子系统中来, 但量子控制仍处于其初期发展阶段, 有很多问题有待人们进一步研究. 现在我们简要地展望NMR量子控制未来可能研究的重要问题.

1) NMR非相干控制: 在NMR中, 通过射频脉冲进行体系的相干控制是十分直接有效的控制模式, 并且给出了许多重要的结果. 然而, 存在一些量子控制任务仅凭借相干控制的方法是无法实现的. 针对这点, 非相干资源需要被引入进来. 最重要的非相干手段包括量子测量、梯度场、相循环、弛豫效应等, 尽管这些非相干效应的数学模型比较清楚, 但相应的受控方动态方程的许多性质还没有完全理解, 因此十分有必要在未来开发系统的新方法中发展精确有效的非相干(或相干与非相干混合)的控制手段.

2) NMR反馈控制: 在经典的控制论中, 反馈占据了重要的地位. 同样在新兴的量子应用中也需发展一套系统的反馈控制方法. 目前, 在NMR中尽管已经有了一定的反馈控制方面的工作, 但是这些实验往往只针对十分具体的控制任务而设计, 还没有解决一些重要的基本问题, 例如在量子反馈中, 测量如何影响量子系统、反馈控制律的一般设计方法、量子系统反馈控制的复杂度如何衡量.

3) 量子系统的鲁棒性控制: 量子系统不可避

免地存在多种不确定性因素, 包括干扰和噪音. 例如, 在传统NMR谱学中, 抑制静场、射频场不均匀性一直是重要的研究课题. 这些不确定性在规模较大的自旋体系上对控制精度造成的影响尤为明显, 因此有必要应用鲁棒控制实现更高精度的主动控制.

4) 更复杂样品体系的操控: 目前NMR量子控制大多局限于考虑液体核磁样品, 进一步可以考虑针对更为复杂的液晶、高自旋、固体等样品建立控制模型, 实现精确调控.

## 参考文献

- [1] Wiseman H M, Milburn G J 2010 *Quantum Measurement and Control* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [2] Dong D, Petersen I R 2010 *IET Control Theory Appl.* **4** 2651
- [3] Alessandro D D 2007 *Introduction to Quantum Control and Dynamics* (London: Chapman & Hall)
- [4] Brif C, Chakrabarti R, Rabitz H 2010 *New J. Phys.* **12** 075008
- [5] Feynman R P 1982 *Int. J. Theor. Phys.* **21** 467
- [6] Nielsen M A, Chuang I L 2010 *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [7] Vandersypen L M K 2001 *Ph. D. Dissertation* (Stanford: Stanford University)
- [8] Vandersypen L M K, Chuang I L 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 1037
- [9] Ryan C A, Negrevergne C, Laforest M, Knill E, Laflamme R 2008 *Phys. Rev. A* **78** 012328
- [10] Chuang I, Vandersypen L, Zhou X, Leung D, Lloyd S 1998 *Nature* **393** 143
- [11] Wu Z, Li J, Zheng W Q, Luo J, Feng M, Peng X H 2011 *Phys. Rev. A* **84** 042312
- [12] Jones J, Mosca M, Hansen R 1998 *Nature* **393** 344
- [13] Vandersypen L M K, Steffen M, Breyta G, Yannoni C S, Sherwood M H, Chuang I L 2001 *Nature* **414** 883
- [14] Lu D W, Zhu J, Zou P, Peng X H, Yu Y H, Zhang S M, Chen Q, Du J F 2010 *Phys. Rev. A* **81** 022308
- [15] Du J F, Xu N Y, Peng X H, Wang P F, Wu S F, Lu D W 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 030502
- [16] Peng X H, Wu S F, Li J, Suter D, Du J F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 240405
- [17] Feng G R, Long G L, Laflamme R 2013 *Phys. Rev. A* **88** 022305
- [18] Laflamme R, Knill E, Zurek W, Catasti P, Mariappan S 1998 *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A* **356** 1941
- [19] Cory D G, Price M D, Maas W, Knill E, Laflamme R, Zurek W H, Havel T F, Somaroo S S 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2152
- [20] Negrevergne C, Mahesh T S, Ryan C A, Ditty M, Cyr-Racine F, Power W, Boulant N, Havel T, Cory D G, Laflamme R 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 170501

- [21] Jones J A 2011 *Prog. Nucl. Mag. Res. Sp.* **59** 91
- [22] Lu D W, Li H, Trottier D A, Li J, Brodutch A, Krishmanich A P, Ghavami A, Dmitrienko G I, Long G L, Baugh J, Laflamme R 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 140505
- [23] Dirac P A M 1958 *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford: Oxford University Press)
- [24] Rivas Á, Huelga S F 2012 *Open Quantum Systems: An Introduction* (New York: Springer-Verlag)
- [25] Heinosaari T, Ziman M 2012 *The Mathematical Language of Quantum Theory: From Uncertainty to Entanglement* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [26] Hayashi M 2006 *Quantum Information: An Introduction* (New York: Springer-Verlag)
- [27] Barenco A, Bennett C H, Cleve R, DiVincenzo D P, Margolus N, Shor P, Sleator T, Smolin J A, Weinfurter H 1995 *Phys. Rev. A* **52** 3457
- [28] Breuer H P, Petruccione F 2002 *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford: Oxford University Press)
- [29] Schrödinger E 1926 *Phys. Rev.* **28** 1049
- [30] Kraus K 1983 *States, Effects and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory* (New York: Springer-Verlag)
- [31] Lindblad G 1976 *Commun. Math. Phys.* **48** 119
- [32] Weiss U 1999 *Quantum Dissipative Systems* (Singapore: World Scientific)
- [33] Laforest M 2008 *Ph. D. Dissertation* (Waterloo: University of Waterloo)
- [34] Andersson E, Cresser J D, Hall M J W 2007 *J. Mod. Opt.* **54** 1695
- [35] Werschnik J, Gross E K U J 2007 *Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 175
- [36] Elliott D L 2009 *Bilinear Control Systems: Matrices in Action* (New York: Springer-Verlag)
- [37] Fouquieres P, Schirmer S G 2010 *arXiv:1004.3492v1* [quant-ph]
- [38] Stengel R F 1994 *Optimal Control and Estimation* (New York: Dover Publications)
- [39] Ramakrishna V, Rabitz H 1996 *Phys. Rev. A* **54** 1715
- [40] Albertini F, D'Alessandro D 2003 *IEEE Trans. Autom. Control* **48** 1399
- [41] Ibort A, Pérez-Pardo J M 2009 *Phys. A: Math. Theor.* **42** 205301
- [42] Levitt M H 2008 *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance* (England: John Wiley & Sons Ltd)
- [43] Smith S A, Palke W E, Gerig J T 1992 *Concepts in Magnetic Resonance* **4** 107
- [44] Smith S A, Palke W E, Gerig J T 1992 *Concepts in Magnetic Resonance* **4** 181
- [45] Smith S A, Palke W E, Gerig J T 1992 *Concepts in Magnetic Resonance* **5** 151
- [46] Smith S A, Palke W E, Gerig J T 1992 *Concepts in Magnetic Resonance* **6** 137
- [47] Kowalewski J Mäler L 2006 *Nuclear Spin Relaxation in Liquids: Theory, Experiments, and Applications* (Boca Raton: Taylor & Francis Group)
- [48] Freeman R 1998 *Prog. Nucl. Mag. Res. Sp.* **32** 59
- [49] Bauer C, Freeman R, Frenkiel T, Keeler J, Shaka A J 1984 *J. Magn. Reson.* **58** 442
- [50] Temps A J, Brewer C F 1984 *J. Magn. Reson.* **56** 355
- [51] Warren W S 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 5437
- [52] Peng X H, Zhu X W, Fang X M, Feng M, Liu M L, Gao K L 2004 *J. Chem. Phys.* **120** 3579
- [53] Silver M S, Joseph R I, Hoult D I 1984 *J. Magn. Reson.* **59** 347
- [54] Geen H, Freeman R 1991 *J. Magn. Reson.* **93** 93
- [55] Steffen M, Vandersypen L, Chuang I 2000 *J. Magn. Reson.* **146** 369
- [56] Elster A D 1993 *Radiology* **186** 1
- [57] Bloembergen N, Pound R V 1954 *Phys. Rev.* **95** 1
- [58] Szöke A, Meiboom S 1959 *Phys. Rev.* **113** 2
- [59] Altafini C, Cappellaro P, Cory D 2010 *Systems & Control Letters* **59** 782
- [60] Mao X A, Ye C H 1997 *Concepts Magn. Reson.* **9** 173
- [61] Born M, Fock V A 1928 *Zeitschrift für Physik A* **51** 165
- [62] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S, Lapan J, Lundgren A, Preda D 2001 *Science* **292** 472
- [63] Mizel A, Lidar D A, Mitchell M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 070502
- [64] Amin M H S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 130503
- [65] Roland J, Cerf N J 2002 *Phys. Rev. A* **65** 042308
- [66] Peng X H, Liao Z Y, Xu N Y, Qin G, Zhou X Y, Suter D, Du J F 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 220405
- [67] Peng X H, Zhang J F, Du J F, Suter D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 140501
- [68] Steffen M, van Dam W, Hogg T, Breyta G, Chuang I 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 067903
- [69] Mitra A, Mitra A, Ghosh A, Das R, Patel A, Kumar A 2005 *J. Magn. Res.* **177** 285
- [70] Xu N Y, Zhu J, Lu D W, Zhou X Y, Peng X H, Du J F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 130501
- [71] Garey M R, Johnson D S 1979 *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness* (San Francisco: Freeman)
- [72] Žnidarič M, Horvat M 2006 *Phys. Rev. A* **73** 022329
- [73] Hogg T 2003 *Phys. Rev. A* **67** 022314
- [74] Žnidarič M 2005 *Phys. Rev. A* **71** 062305
- [75] Peng X H, Du J F, Dieter S 2005 *Phys. Rev. A* **71** 012307
- [76] Li Z K, Zhou H, Ju C Y, Chen H W, Zheng W Q, Lu D W, Rong X, Duan C K, Peng X H, Du J F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 220501
- [77] Peng X H, Luo Z H, Zheng W Q, Kou S P, Suter D, Du J F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 080404
- [78] Gershenfeld N, Chuang I L 1997 *Science* **275** 350
- [79] Knill E, Chuang I, Laflamme R 1998 *Phys. Rev. A* **57** 3348
- [80] Cory D G, Price M D, Havel T F 1998 *Physica D* **120** 82
- [81] Schulman L J, Mor T, Weinstein Y 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 120501
- [82] Ryan C A, Moussa O, Baugh J, Laflamme R 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 140501
- [83] Fortunato E M, Pravia M A, Boulant N, Teklemariam G, Havel T F, Cory D G 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 7599
- [84] Jeffries C D 1963 *Dynamic Nuclear Orientation* (New York: Wiley)

- [85] Muus L T, Atkins P W, McLauchlan K A, Pedersen J B 1977 *Chemically Induced Magnetic Polarization* (Dordrecht: D. Reidel)
- [86] Li J, Lu D W, Luo Z H, Laflamme R, Peng X H, Du J F 2014 arXiv:1412.4146v1
- [87] Ernst R R, Bodenhausen G, Wokaun A 1987 *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions* (Oxford: Oxford University Press)
- [88] Sørensen O W 1989 *Progress in NMR Spectroscopy* **21** 503
- [89] Sørensen O W 1990 *J. Magn. Reson.* **86** 435
- [90] Stoustrup J, Schedletzky O, Glaser S J, Griesinger C, Nielsen N C, Sørensen O W 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2921
- [91] Horn R A, Johnson C R 2013 *Matrix Analysis* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [92] Waugh J S, Huber L M, Haeberlen U 1968 *Phys. Rev. Lett.* **20** 180
- [93] Mansfield P 1971 *J. Phys. C: Solid State Physics* **4** 1444
- [94] Burum D P, Linder M, Ernst R R 1981 *J. Magn. Reson.* **44** 173
- [95] Uhrig G S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 100504
- [96] Maudsley A A 1986 *J. Magn. Reson.* **69** 488
- [97] Khodjasteh K, Lidar D A 2007 *Phys. Rev. A* **75** 062310
- [98] Khaneja N, Brockett R, Glaser S J 2001 *Phys. Rev. A* **63** 032308
- [99] Khaneja N, Glaser S J 2001 *Chem. Phys.* **267** 11
- [100] Li B, Yu Z H, Fei S M, Li-Jost X Q 2013 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **56** 2116
- [101] Bonnard B, Sugny D 2009 *Control and Cybernetics* **38** 1053
- [102] Boulant N, Edmonds K, Yang J, Pravia M A, Cory D G 2003 *Phys. Rev. A* **68** 032305
- [103] Khaneja N, Reiss T, Kehlet C, Herbrüggen T S, Glaser S J 2005 *J. Magn. Reson.* **172** 296
- [104] Rabitz A H, Hsieh M M, Rosenthal C M 2004 *Science* **303** 1998
- [105] Ho T S, Dominy J, Rabitz H 2009 *Phys. Rev. A* **79** 013422
- [106] Hsieh M, Rabitz H 2008 *Phys. Rev. A* **77** 042306
- [107] Hsieh M, Rabitz H, Lidar D 2010 *Phys. Rev. A* **81** 062352
- [108] Knill E, Laflamme R, Martinez R, Tseng C H 2000 *Nature* **404** 368
- [109] Wiseman H M 1995 *Modern Phys. Lett. B* **9** 11
- [110] Judson R S, Rabitz H 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 10
- [111] Back T 1996 *Evolutionary Algorithms in Theory and Practice* (Oxford: Oxford University Press)
- [112] Belavkin V P 1983 *Autom. Remote Control* **44** 178
- [113] Wiseman H M, Milburn G J 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 548
- [114] Wiseman H M 1994 *Phys. Rev. A* **49** 2133
- [115] Chen C L, Wang L C, Wang Y Y 2013 *Sci. World J.* **2013** 869285
- [116] Huang S Y, Witzel T, Wald L L 2008 *Magnet. Reson. Med.* **60** 5
- [117] Huang S Y, Chung A P, Lin Y Y 2007 *Concept. Magn. Reson. A* **30** 6
- [118] Huang S Y, Yang S S, Lin Y Y 2009 *Magnet. Reson. Med.* **61** 4
- [119] Altafini C 2007 *Quantum Information Processing* **6** 1
- [120] Jäger G 2014 *Phys. Rev. A* **90** 033628
- [121] Said R S, Twamley J 2009 *Phys. Rev. A* **80** 032303
- [122] Spörl A, Schulte-Herbrüggen T, Glaser S J 2007 *Phys. Rev. A* **75** 012302

SPECIAL ISSUE — Quantum metrology and control

# Quantum control of nuclear magnetic resonance spin systems\*

Li Jun<sup>1)</sup> Cui Jiang-Yu<sup>1)</sup> Yang Xiao-Dong<sup>1)</sup> Luo Zhi-Huang<sup>1)</sup> Pan Jian<sup>1)</sup> Yu Qi<sup>1)</sup>  
 Li Zhao-Kai<sup>1)</sup> Peng Xin-Hua<sup>1)2)†</sup> Du Jiang-Feng<sup>1)2)</sup>

1) (*Hefei National Laboratory for Physical Sciences at Microscale, Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

2) (*Synergetic Innovation Center of Quantum Information and Quantum Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

( Received 29 April 2015; revised manuscript received 12 June 2015 )

## Abstract

With the development of quantum information science, the active manipulation of quantum systems is becoming an important research frontier. To build realistic quantum information processors, one of the challenges is to implement arbitrary desired operations with high precision on quantum systems. A large number of quantum control methods and relevant numerical techniques have been put forward in recent years, such as quantum optimal control and quantum feedback control. Nuclear magnetic resonance (NMR) spin systems offer an excellent testbed to develop benchmark tools and techniques for controlling quantum systems. In this review paper, we briefly introduce some of the basic control ideas developed for NMR systems in recent years. We first explain, for the liquid spin systems, the physics of various couplings and the causes of relaxation effects. These mechanisms govern the system dynamics, and thus are crucial for constructing rigorous and efficient control models. We also identify three types of available control means: 1) radio-frequency fields as coherent controls; 2) phase cycling, gradient fields and relaxation effects as non-unitary controls; 3) radiation damping effect as feedback control mechanism. Then, we elucidate some important control tasks, which may arise from the conventional NMR spectroscopy (e.g., pulse design and polarization transfer) or from quantum information science (e.g., algorithmic cooling and pseudo-pure state preparation). In the last part, we review some of the most important control methods that are applicable to NMR control tasks. For systems with a relatively small number of spins, it is possible to use analytic optimal control theory to realize the target unitary operations. However, for larger systems, numerical methods are necessary. The gradient ascent pulse engineering algorithm and pulse compiler techniques are the most successful techniques for implementing complicated quantum networks currently. There are some interesting topics of utilizing radiation damping and relaxation effects to achieve more powerful controls. Finally, we give an outline of the possible future work.

**Keywords:** quantum control, quantum computation, nuclear magnetic resonance

**PACS:** 76.60.-k, 03.65.Yz, 03.67.Lx

**DOI:** 10.7498/aps.64.167601

\* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2013CB921800, 2014CB848700), the National Natural Science Fund for Distinguished Young Scholars of China (Grant No. 11425523), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11375167, 11227901, 91021005), the Strategic Priority Research Program (B) of Chinese Academy of Sciences (Grant No. XDB01030400), and the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20113402110044).

† Corresponding author. E-mail: [xhpeng@ustc.edu.cn](mailto:xhpeng@ustc.edu.cn)