

Diplomarbeit

Skalenverhalten und Kontrolle von Quanten-Netzwerken

vorgelegt von
Marcus Stollsteimer

12. Dezember 2000

Hauptberichter: Prof. Dr. G. Mahler
Mitberichter: Prof. Dr. R. Friedrich

Institut für Theoretische Physik I
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Ungenaue Operationen: Externe Parameter-Schwankungen	4
2.1. Einleitung	4
2.2. Zufalls-Operatoren	5
2.3. Dichteoperator unter Zufalls-Transformation	6
2.4. Allgemeine unitäre Drehung	7
2.5. Dichteoperator unter Zufalls-Drehung	8
2.6. Beispiel einer zufälligen Ein-Qubit-Operation	9
2.7. Beispiel einer zufälligen Zwei-Qubit-Operation	12
2.8. Zusammenfassung	14
3. Externe Kontrollfehler: Einfluss auf den Grover-Algorithmus	16
3.1. Einleitung	16
3.2. Grundlagen des Such-Algorithmus	18
3.3. Fehlerhafte Operationen	20
3.4. Fehlermodell 1 („Ungenaue Drehung“)	21
3.4.1. Systematischer Fehler	22
3.4.2. Zufälliger Fehler	22
3.5. Fehlermodell 2 („Ungenaue Phaseninversion“)	24
3.5.1. Systematischer Fehler	24
3.5.2. Zufälliger Fehler	26
3.6. Zusammenfassung	28
4. Interne System-Fehler:	
Einfluss unerwünschter Kopplungen zwischen Qubits	30
4.1. Einleitung	30
4.2. Zeitentwicklung eines n -Niveau-Systems	30
4.3. Hamiltonoperator der Spinkette	32
4.4. Zeitentwicklung im $F_z=1$ -Unterraum	35
4.4.1. Periodizität	38
4.4.2. Verhalten für große N	38
4.4.3. Verhalten für kleine t	39

Inhaltsverzeichnis

4.4.4. F von speziellen Anfangs-Zuständen	39
4.4.5. Delokalisierungszeit	41
4.5. Zusammenfassung	42
5. Kompensation interner System-Fehler:	
Entkopplung von wechselwirkenden Qubits	43
5.1. Einleitung	43
5.2. Grundlagen	44
5.2.1. Entwicklung eines Spinsystems unter einer Pulsfolge	44
5.2.2. Average Hamiltonian Theory (AHT)	47
5.2.3. Beispiel: Average Hamiltonian für eine 2τ -Folge	48
5.2.4. Wirkung von Pulsen auf Spinoperatoren	49
5.2.5. Entkopplung bei schwacher J -Kopplung nach Leung	51
5.3. Entkopplung einer allgemeinen Wechselwirkung	52
5.3.1. Unitäre Transformation von Wechselwirkungshamiltonians	53
5.3.2. Average Hamiltonian für eine allgemeine Wechselwirkung	54
5.3.3. Selektivität	55
5.3.4. Pulsfolgen für $N = 2$	56
5.4. Entkopplung von $N > 2$ Spins	58
5.4.1. Entkopplung mit nicht-selektiven Pulsfolgen	59
5.4.2. Entkopplung mit selektiven Pulsfolgen	59
5.5. Beispiel: „Do-Nothing-Sequence“ (DNS)	67
5.6. Effizienz für eine (m,n) -Pulsfolge	70
5.6.1. Beispiel: DNS	72
5.7. Zusammenfassung	73
6. Entkopplung unter externen Kontrollfehlern	75
6.1. Einleitung	75
6.2. Fehlerhaftes Entkoppeln für schwache J -Kopplung	75
6.3. Fehlerhaftes Entkoppeln für starke J -Kopplung	78
6.4. Quantensimulation	80
6.5. Zusammenfassung	80
7. Zusammenfassung und Ausblick	82
A. Hausdorff-Formel für rekursive Kommutatoren	84
B. Eigenwerte einer Spinkette	85
C. Bessel-Funktionen	87
Literaturverzeichnis	89
Danksagung	93

1. Einleitung

Das Konzept der Quanteninformationsverarbeitung ist eine der aufregendsten Neuentwicklungen der letzten Jahre in der Physik. Die Ausnutzung der Quantenmechanik zur Konstruktion eines informationsverarbeitenden Systems eröffnet völlig neue Möglichkeiten. Verschiedene Probleme, die mit klassischen Computern schwer lösbar sind, könnten mit Quantenalgorithmen effizienter gelöst werden. Allerdings sind die meisten bisherigen Ergebnisse nur theoretischer Art. Die experimentelle Realisierung eines Quantencomputers, der an die Leistung der heutigen Großrechner herankommt, ist in näherer Zukunft nicht abzusehen, vielleicht sogar ganz unmöglich.

Die physikalischen Systeme, die zur Implementierung benutzt werden können, müssen eine Vielzahl von Bedingungen erfüllen. Im Gespräch sind die verschiedensten Systeme, wie Ionen in einer Ionenfalle [1], neutrale Atome [2], Kernspin-Systeme (NMR) [3, 4], Quantenpunkte [5] oder Supraleiter [6]. Die bisher experimentell realisierten Implementierungen sind größtenteils auf zwei oder drei Qubits beschränkt. Sie sind lediglich dafür geeignet, grundsätzliche Fragen zu klären. Das wahrscheinlich größte Problem ist es, Systeme zu finden, die auf eine genügend große Anzahl von Qubits ($> 10^2$) skaliert werden können.

Die Realisierung größerer Systeme wird durch verschiedene Effekte erschwert. Ein Problem ist die Dekohärenz, die für größere Systeme stark zunimmt. Dadurch verringert sich die Zeit, die für die Durchführung eines Algorithmus zur Verfügung steht. Demgegenüber nimmt die Anzahl der logischen Operationen zu, die in dieser Zeit durchgeführt werden müssen. Ferner kann als eine weitere Schwierigkeit noch hinzukommen, dass die Taktfrequenz, mit der logische Operationen durchgeführt werden können, mit der Systemgröße abnimmt. Das ist z. B. bei der NMR der Fall, wo für größere Systeme weichere und damit längere Pulse nötig sind, um die Spins adressieren zu können. Dadurch wird die Gesamtzahl an Operationen verringert, die in einer gegebenen Zeit durchgeführt werden können. Je größer das System ist, desto schwieriger kann es also kontrolliert werden.

Ein weiteres Problem ist das Skalenverhalten der Algorithmen an sich. Es stellt sich die Frage, wie empfindlich die Algorithmen auf Fehler bei der Implementation in Form von geringfügigen Schwankungen der externen Kontrollparameter reagieren. Dieses Problem betrifft alle physikalischen Realisierungen gleichermaßen, da sich Fehler nie vermeiden lassen. Im schlimmsten Fall wird der Algorithmus so langsam, dass er keinen Vorteil vor der klassischen Rechnung bedeutet, oder bricht

1. Einleitung

sogar vollständig zusammen.

Zu den äußeren Fehlerquellen wie Dekohärenz und ungenaue Gatteroperationen kommen außerdem dem System inhärente Fehlerquellen hinzu. So wird als idealisiertes Modell davon ausgegangen, dass keine unerwünschten Wechselwirkungen innerhalb eines Quantenregisters vorhanden sind. Tatsächlich sind aber in vielen Systemen solche Wechselwirkungen unvermeidbar. Das führt zu hohen Anforderungen an die kompensierende Kontrolle, die auf das System ausgeübt werden muss. Auch dieses Kontrollproblem wächst mit der Größe des Systems.

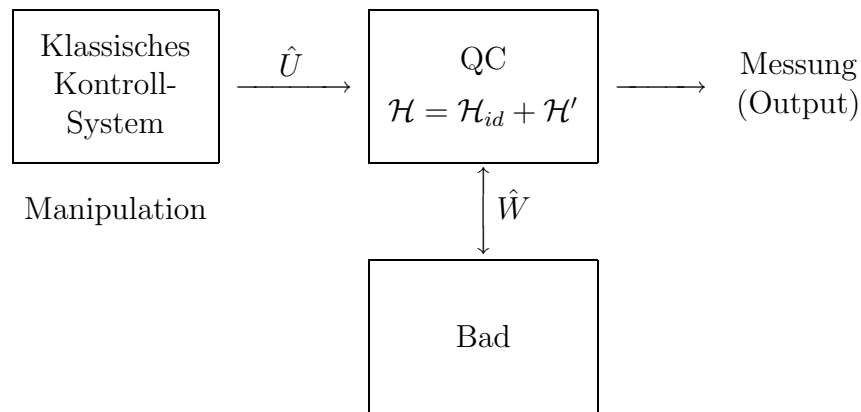


Abb. 1.1.: Beziehungen zwischen Quantencomputer und Umgebung

Diese Situation soll in Abbildung 1.1 noch einmal verdeutlicht werden. Mögliche Fehlerquellen liegen bei den externen Kontrolloperationen \hat{U} , der Dekohärenz in Form von Wechselwirkungen \hat{W} mit einem Bad und der Abweichung des internen Hamiltonoperators \mathcal{H} vom gewünschten \mathcal{H}_{id} . Die abschließende Messung soll hier als ideal angenommen werden.

Ein möglicher Ansatz, um das Dekohärenz-Problem in den Griff zu bekommen, besteht in den Methoden der Fehlerkorrektur (QEC: quantum error correction). Dabei wird über geeignete Codierung und sequenzielle Korrekturschritte der Einfluss wohldefinierter Bäder teilweise unterdrückt [7, 8]. Weitere Möglichkeiten sind quantum error avoiding [9, 10] und aus der NMR-Spektroskopie abgeleitete sogenannte Refocusing-Verfahren [11]. Diese Methoden stellen aber in der Regel zusätzliche Anforderungen an die verwendeten Ressourcen; so werden zusätzliche Kontrolloperationen benötigt, und teilweise auch weitere Qubits. Allgemein verkomplizieren diese Verfahren die ursprüngliche Problemstellung und können ihrerseits selbst neue Störungen in das System einführen.

Eine fehlerhafte Kontrolldynamik ist insofern nicht korrigierbar, als die fehlerhafte Operation nicht von einer möglicherweise gewünschten unterschieden werden kann. Dies ist grundsätzlich eine ähnliche Problematik wie bei klassischen Analogcomputern.

Im Folgenden sollen einige Aspekte dieser Skalierungs- und Kontrollprobleme un-

tersucht werden. Dazu wird in Kapitel 2 der Frage nachgegangen, wie sich eine Folge von einfachen Ein- und Zwei-Qubit-Operationen auswirkt, wenn diese Operationen mit Fehlern behaftet sind. Diese Fragestellung wird in Kapitel 3 weiter ausgedehnt auf einen Quantenalgorithmus, in diesem Fall den Suchalgorithmus von Grover. Kapitel 4 beschäftigt sich mit der Dynamik eines nicht-idealen Quantenregisters, das durch eine lineare Spinkette mit Wechselwirkungen zwischen benachbarten Spins modelliert wird. Eine Methode, um in derartigen Systemen eine unerwünschte Zeitentwicklung zu unterdrücken, wird in Kapitel 5 in Form der an die Refocusing-Verfahren der NMR angelehnten Entkopplung von Wechselwirkungen mit Pulsfolgen beschrieben. Schließlich werden die Gedanken aus den Kapiteln 2 bzw. 3 und Kapitel 5 kombiniert. Das führt zu der in Kapitel 6 betrachteten Frage, wie sich externe Kontrollfehler auf Entkopplungs-Verfahren auswirken.

2. Ungenaue Operationen: Externe Parameter-Schwankungen

2.1. Einleitung

Ein wichtiger Schritt in der Entwicklung der Theorie der Quanteninformationsverarbeitung war die Entwicklung von Verfahren zur Fehlerkorrektur. Mit diesen Methoden lassen sich Fehler korrigieren, die durch Dekohärenz entstehen. Sie beruhen darauf, dass Kenntnisse über die Beschaffenheit der Wechselwirkung mit dem Bad ausgenutzt werden, um zwischen einer Nutzdynamik und einer Fehlerdynamik zu unterscheiden. Dazu werden die logischen Zustände geeignet codiert. In den nächsten beiden Kapiteln soll gezeigt werden, wie sich Fehler in den Kontrolloperationen auf einen Quantenalgorithmus auswirken. Solche Fehler können nicht durch entsprechende Methoden korrigiert werden. Das wird deutlich, wenn man eine klassische Kontrolldynamik betrachtet, die durch eine Kontrolloperation $\hat{U}(\alpha(t))$ gegeben ist. Dabei soll $\alpha(t)$ einen kontinuierlich einstellbaren Kontrollparameter darstellen, wie z. B. einen Winkel bei einer unitären Drehung. Wenn α durch ein Rauschen gestört ist, so führt dies zu nicht korrigierbaren Fehlern, da keine Unterscheidung zwischen einer Nutz- und einer Fehlerdynamik möglich ist. Man hat hier also ein ganz ähnliches Problem wie bei einem klassischen Analogrechner.

Bei einem Quantencomputer, der einen bestimmten Algorithmus ausführen soll, müssen viele aufeinanderfolgende Operationen ausgeführt werden. Das ist nur in der Theorie ideal durchführbar, in der tatsächlichen experimentellen Umsetzung werden die Operationen immer mit Fehlern behaftet sein. Die („klassischen“) Parameter, die die beabsichtigte Operation charakterisieren, sind nicht beliebig genau einstellbar und reproduzierbar, sondern sind durch eine gewisse Zufallsverteilung gekennzeichnet. Die Operation ist somit zufälligen Schwankungen unterworfen und bei jeder Realisierung unterschiedlich.

Beim Quantum Computing mit NMR werden die unitären Operationen durch Radiopulse implementiert. Dabei sind zwei der Parameter die Länge eines Pulses und die Magnetfeldstärke, die während des Pulses im System vorliegt. Abweichungen von den Sollwerten führen zu einer Abweichung der Operation von der für eine korrekte Ausführung des Algorithmus theoretisch notwendigen.

Durch die Fehler in den Parametern, und damit durch die Unkenntnis der tatsächlich realisierten Operationen, kommt es auch zu einer Unkenntnis des durch einen gegebenen Algorithmus erzielten Endzustands, der sich in einer Entropiezunahme des Quantensystems zeigt. Im Folgenden soll näher betrachtet werden, wie sich die Entropie eines Systems verhält, das einer Folge von fehlerhaften Operationen unterworfen wird.

2.2. Zufalls-Operatoren

Operationen, wie zum Beispiel eine gepulste unitäre Transformation bei einem NMR-Experiment, sind in der Regel von einer Vielzahl von Parametern abhängig, wie Pulsdauer, Feldstärken, Feldinhomogenitäten usw. Diese Parameter sind dabei nur im Rahmen einer gewissen Genauigkeit einstellbar, so dass z. B. der Drehwinkel bei einer unitären Drehung mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung vom Sollwert abweicht.

Solche Operatoren, die von einem Zufallsparameter abhängen und daher bei jeder Anwendung unterschiedlich sind, sollen im Folgenden näher betrachtet werden. Dabei wird angenommen, dass der Parameter jeweils normalverteilt ist, mit einem Erwartungswert von 0. Systematische Abweichungen sollen also hier nicht berücksichtigt werden.

Definition 2.1 (NDP-Operator) *Ein NDP-Operator („normal distributed parameter“) ist ein parameterabhängiger Operator $\hat{U}(\delta)$, wobei δ normalverteilt ist mit der Wahrscheinlichkeitsdichte*

$$w(\delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\delta^2}{2\sigma^2}} \quad (2.1)$$

Bei jeder Realisierung dieses Operators liegt also mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $w(\delta)$ ein Wert δ vor.

Für die wiederholte Anwendung eines solchen Operators gilt folgender Satz:

Satz 2.2 („Produkt-Regel“) *Gilt für einen Operator $\hat{U}(\delta)$ die Beziehung*

$$\prod_{k=1}^j \hat{U}(\delta_k) = \hat{U}'\left(\sum_{k=1}^j \delta_k\right) \quad (2.2)$$

so ist die j -malige Anwendung des NDP-Operators $\hat{U}(\delta)$ mit Standardabweichung σ wieder ein NDP-Operator $\hat{U}'(\delta')$ mit Standardabweichung $\sqrt{j}\sigma$.

Beweis: Der Satz folgt aus den Eigenschaften von normalverteilten, voneinander unabhängigen Zufallsgrößen [12]. Für zwei unabhängige Zufallsgrößen X und Y mit den Verteilungen $f_1(x)$ bzw. $f_2(y)$ gilt: die Verteilung $f(z)$ der Summe $Z = X + Y$ ist die Faltung der Verteilungen der einzelnen Summanden,

2. Ungenaue Operationen: Externe Parameter-Schwankungen

$f(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x)f_2(z-x) dx$. Insbesondere ergibt sich für normalverteilte X und Y mit den Erwartungswerten a_1, a_2 und Standardabweichungen σ_1, σ_2 , dass Z wieder normalverteilt ist mit dem Erwartungswert $a_1 + a_2$ und der Standardabweichung $\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}$. Also ist auch $\Delta = \sum_{k=1}^j \delta_k$ ein normalverteilter Zufallsparameter, mit der Standardabweichung $\sqrt{j} \sigma$. \square

2.3. Dichteoperator unter Zufalls-Transformation

Als Nächstes soll der Dichteoperator eines Systems betrachtet werden, auf das ein (unitärer) NDP-Operator wirkt. Das mittlere Verhalten des Systems ist gegeben durch ein Ensemble aller möglichen Realisierungen dieses Operators.

Zunächst soll der Operator nur einmal auf das System angewendet werden. Dieses kann sich dabei am Anfang in einem reinen oder gemischten Zustand befinden. Ein parameterabhängiger unitärer Operator lässt sich mittels eines hermiteschen Operators \hat{H} ausdrücken als

$$\hat{U}(\delta) = \hat{U}_0 e^{-i\hat{H}(\delta)} \quad (2.3)$$

Wenn man δ als den Fehler betrachtet und \hat{H} so wählt, dass $\hat{H}(\delta) = 0$ für $\delta = 0$, dann stellt \hat{U}_0 gerade den „Solloperator“ dar, der bei Abwesenheit eines Fehlers implementiert wird. Systematische Fehler können dabei in \hat{U}_0 mit berücksichtigt werden.

Das System soll sich am Anfang in einem Zustand mit der Dichtematrix $\hat{\rho}_0$ befinden. Für einen kohärenten Anfangszustand gilt dabei $\hat{\rho}_0 = |\psi\rangle\langle\psi|$. Durch den NDP-Operator $\hat{U}(\delta)$ wird ein einzelnes Ensemblemitglied in den Zustand $|\psi'(\delta)\rangle = \hat{U}(\delta)|\psi\rangle$ bzw. $\hat{\rho}'_0(\delta) = \hat{U}(\delta)\hat{\rho}_0\hat{U}^\dagger(\delta)$ überführt. Diese Zustände sind verteilt mit $w(\delta)$. Man erhält also den Dichteoperator für das Ensemble zu

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\delta w(\delta)\hat{\rho}'_0(\delta) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\delta w(\delta)\hat{U}(\delta)\hat{\rho}_0\hat{U}^\dagger(\delta) \\ &= \frac{1}{n}\hat{1} + \int_{-\infty}^{\infty} d\delta w(\delta)\hat{U}(\delta)\hat{\rho}_0^{\text{tl}}\hat{U}^\dagger(\delta) \\ &= \hat{U}_0\hat{\rho}'\hat{U}_0^\dagger \end{aligned} \quad (2.4)$$

mit (vgl. (2.3))

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{n}\hat{1} + \int_{-\infty}^{\infty} d\delta w(\delta) e^{-i\hat{H}(\delta)}\hat{\rho}_0^{\text{tl}}e^{i\hat{H}(\delta)} \quad (2.5)$$

Dabei bezeichnet $\hat{\rho}_0^{\text{tl}}$ den spurlosen Teil („traceless“) von $\hat{\rho}_0$. Der Ausgangsdichteoperator lässt sich also schreiben als $\hat{\rho}_0 = \frac{1}{n}\hat{1} + \hat{\rho}_0^{\text{tl}}$. Der Dichteoperator $\hat{\rho}'$ ist nur

eine unitäre Transformation des gesuchten Dichteoperators nach einer einmaligen Anwendung des NDP-Operators und hat insbesondere dieselbe von-Neumann-Entropie (in Einheiten Bit):

$$\begin{aligned} S(\hat{\rho}) &= -\text{Sp} \{ \hat{\rho} \log_2 \hat{\rho} \} \\ &= -\sum_{\nu=1}^n \rho_\nu \log_2 \rho_\nu \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$S(\hat{\rho}') = S(\hat{\rho}) \quad (2.7)$$

Wenn also nur Aussagen über die Entropie gemacht werden sollen, genügt es, $\hat{\rho}'$ zu betrachten. Im folgenden Abschnitt soll eine spezielle Klasse von unitären Operationen betrachtet werden.

2.4. Allgemeine unitäre Drehung

Im Folgenden sollen spezielle unitäre parameterabhängige Operatoren von der Form $\hat{U}(a) = e^{-i\hat{H}(a)}$ betrachtet werden. Diese Operatoren sollen als allgemeine unitäre Drehungen bezeichnet werden, wenn der (hermitesche) Operator $\hat{H}(a)$ linear in a ist, wenn also

$$\hat{H}(a) = a\hat{A} + \hat{B} \quad (2.8)$$

wobei \hat{A} und \hat{B} hermitesch sein sollen. Der Parameter a stellt dabei einen verallgemeinerten Drehwinkel dar.

Wenn \hat{A} und \hat{B} kommutieren, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, dann gilt auch $[e^{\hat{A}}, e^{\hat{B}}] = 0$ und es folgt

$$\hat{U}(a) = e^{-i\hat{B}} e^{-ia\hat{A}} \equiv \hat{U}_0 e^{-ia\hat{A}} \quad (2.9)$$

mit $[\hat{U}_0, \hat{A}] = 0$. Wenn man eine solche Operation mehrfach hintereinander ausführt, jeweils mit unterschiedlichem a , so erhält man

$$\begin{aligned} \prod_{k=1}^j \hat{U}(a_k) &= \prod_{k=1}^j \hat{U}_0 e^{-ia_k \hat{A}} \\ &= \hat{U}_0^j e^{-i \sum_{k=1}^j a_k \hat{A}} \\ &\equiv \hat{U}'\left(\sum_{k=1}^j a_k\right) \end{aligned} \quad (2.10)$$

mit

$$\hat{U}'(a) = \hat{U}_0^j e^{-ia\hat{A}} = \hat{U}_0^{j-1} \hat{U}(a) \quad (2.11)$$

Das heißt also, dass in diesem Fall die Voraussetzungen für Satz 2.2 erfüllt sind. Insbesondere gilt dieses Resultat auch für Drehungen um einen Drehwinkel $\phi_0 + \phi$, mit $\hat{H}(\phi) = (\phi_0 + \phi)\hat{A}$. Wenn ϕ dabei einen normalverteilten Fehler beschreibt, so soll eine solche Drehung als NDP-Drehung bezeichnet werden.

2. Ungenaue Operationen: Externe Parameter-Schwankungen

Definition 2.3 (NDP-Drehung) Eine NDP-Drehung ist ein unitärer NDP-Operator der Form

$$\hat{U}(\delta) = \hat{U}_0 e^{-i\delta\hat{A}} \quad \text{mit } \hat{U}_0 = e^{-i\delta_0\hat{A}} \quad (2.12)$$

Dabei ist \hat{A} hermitesch. Diese Operation entspricht einer Drehung um einen Drehwinkel δ_0 , der mit einem normalverteilten Fehler δ behaftet ist. Für eine NDP-Drehung gilt Satz 2.2.

2.5. Dichteoperator unter Zufalls-Drehung

Wenn man eine NDP-Drehung auf ein System anwendet, so erhält man mit Gleichung (2.5) den Dichteoperator

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{n} \hat{1} + \int_{-\infty}^{\infty} d\delta w(\delta) e^{-i\delta\hat{A}} \hat{\rho}_0^{\text{tl}} e^{i\delta\hat{A}} \quad (2.13)$$

Dieser Dichteoperator soll für zwei Spezialfälle näher betrachtet werden.

Dichteoperator für kleine δ

Wenn die auftretenden Fehler sehr klein sind, kann man die Exponentialfunktion nähern durch

$$e^{-i\delta\hat{A}} \approx \hat{1} - i\delta\hat{A} \quad (2.14)$$

Wird berücksichtigt, dass $w(\delta)$ (siehe Definition 2.1) eine gerade Funktion ist und somit alle Terme im Integranden wegfallen, die ungerade Funktionen von δ sind, erhält man aus (2.13)

$$\begin{aligned} \hat{\rho}' &= \frac{1}{n} \hat{1} + \hat{\rho}_0^{\text{tl}} + \int_{-\infty}^{\infty} d\delta w(\delta) \delta^2 \hat{A} \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \hat{A} \\ \hat{\rho}' &= \hat{\rho}_0 + \sigma^2 \hat{A} \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \hat{A} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Dichteoperator für rekursiven Kommutator

In beschränkten Systemen mit endlichdimensionalen Hilberträumen gelten oft rekursive Beziehungen für Kommutatorrelationen. Dann kann der Dichteoperator (2.13) auch vereinfacht werden. Es gelte die Beziehung

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \right] \right] \right] = q \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \right] \quad (2.16)$$

Mit der Hausdorff-Formel (A.1) lässt sich (2.13) dann vereinfachen. Dabei entfallen bei der Integration die Sinus-Terme. Es folgt also

$$\begin{aligned} \hat{\rho}' &= \frac{1}{n} \hat{1} + \int_{-\infty}^{\infty} d\delta w(\delta) \left(\hat{\rho}_0^{\text{tl}} + \frac{1}{q} (\cos(\sqrt{q}\delta) - 1) \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \right] \right] \right) \\ &= \frac{1}{n} \hat{1} + \hat{\rho}_0^{\text{tl}} + \frac{1}{q} (e^{-\frac{q\sigma^2}{2}} - 1) \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \right] \right] \end{aligned} \quad (2.17)$$

2.6. Beispiel einer zufälligen Ein-Qubit-Operation

Diese Gleichung gilt bei einmaliger Anwendung des Operators. Um den Dichteoperator nach j Anwendungen zu erhalten, kann man wegen der Gültigkeit von (2.10) für NDP-Drehungen Satz 2.2 anwenden. Man erhält $\hat{\rho}$ dann, indem man \hat{U} durch $\hat{U}'(\delta) = \hat{U}_0^j e^{-i\delta\hat{A}}$ ersetzt, mit der neuen Standardabweichung $\sqrt{j}\sigma$. Also

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \hat{U}_0^j \hat{\rho}' (\hat{U}_0^j)^\dagger \\ \hat{\rho}' &= \frac{1}{n} \hat{1} + \hat{\rho}_0^{\text{tl}} + \frac{1}{q} (e^{-\frac{iq\sigma^2}{2}} - 1) \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \right] \right] \\ &= \hat{\rho}_0 + \frac{1}{q} (e^{-\frac{iq\sigma^2}{2}} - 1) \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0 \right] \right]\end{aligned}\quad (2.18)$$

Später wird ein Beispiel betrachtet, bei dem außerdem gilt

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \right] \right] = q\hat{\rho}_0^{\text{tl}} + p\hat{A}\quad (2.19)$$

Dann lässt sich (2.18) weiter vereinfachen, und man erhält

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \hat{U}_0^j \hat{\rho}' (\hat{U}_0^j)^\dagger \\ \hat{\rho}' &= \frac{1}{n} \hat{1} + e^{-\frac{iq\sigma^2}{2}} \hat{\rho}_0^{\text{tl}} + \frac{p}{q} (e^{-\frac{iq\sigma^2}{2}} - 1) \hat{A}\end{aligned}\quad (2.20)$$

Die Eigenwerte ρ_ν von $\hat{\rho}$ sind für $p = 0$

$$\rho_\nu = \frac{1}{n} + e^{-\frac{iq\sigma^2}{2}} \rho_{0,\nu}^{\text{tl}}\quad (2.21)$$

Daraus erhält man dann die Entropie gemäß (2.6).

2.6. Beispiel einer zufälligen Ein-Qubit-Operation

Als erstes Beispiel für das bisher Gesagte soll eine zufällige Ein-Qubit-Operation betrachtet werden. Dabei soll es sich um eine unitäre Drehung eines einzelnen Qubits um die y -Achse handeln. Diese Operation wird auch noch später im Kapitel über den Grover-Algorithmus verwendet werden. Eine Drehung um die y -Achse lässt sich schreiben als

$$\hat{U}(\phi) = e^{-\frac{i}{2}a\phi\hat{\sigma}_y} = e^{-ia\phi\hat{A}}\quad (2.22)$$

mit

$$\hat{A} = \frac{a}{2} \hat{\sigma}_y\quad (2.23)$$

Dabei ist für y -Pulse bei einem NMR-Experiment $a = 1$. Zur Berechnung des Dichteoperators wird folgende Eigenschaft für Ein-Qubit-Operatoren verwendet:

2. Ungenaue Operationen: Externe Parameter-Schwankungen

Hilfssatz 2.4 Für zwei Operatoren $\hat{A} = \sum_{k=1}^3 a_k \hat{\sigma}_k$ und $\hat{B} = \sum_{k=1}^3 b_k \hat{\sigma}_k$ gilt

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right] = 4\mathbf{a}^2 \hat{B} - 4(\mathbf{a}\mathbf{b})\hat{A} \quad (2.24)$$

$$\text{und} \quad \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right] \right] = 4\mathbf{a}^2 \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \quad (2.25)$$

für beliebige $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ und $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$.

Damit folgt für $\hat{A} = \sum_{k=1}^3 a_k \hat{\sigma}_k$, $\hat{\rho}_0^{\text{tl}} = \sum_{k=1}^3 \lambda_k \hat{\sigma}_k$ die Beziehung

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \right] \right] = 4\mathbf{a}^2 \hat{\rho}_0^{\text{tl}} - 4(\mathbf{a}\boldsymbol{\lambda})\hat{A} \quad (2.26)$$

In diesem Fall gilt also für $\hat{\rho}$ die Gleichung (2.20). Im Folgenden soll $\hat{\rho}$ für verschiedene Ausgangszustände berechnet werden.

Kohärenter Ausgangszustand

Zunächst soll ein kohärenter Ausgangszustand betrachtet werden, mit

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta e^{i\gamma} |1\rangle \quad (2.27)$$

wobei $\alpha, \beta \geq 0$, $\alpha^2 + \beta^2 = 1$. Für den spurlosen Teil der Ausgangsdichtematrix erhält man dann

$$\hat{\rho}_0^{\text{tl}} = \left(\frac{1}{2} - \alpha^2 \right) \hat{\sigma}_z + \alpha\beta (\hat{\sigma}_x \cos \gamma - \hat{\sigma}_y \sin \gamma) \quad (2.28)$$

Daraus folgt der Kommutator $\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\rho}_0^{\text{tl}} \right] \right] = q\hat{\rho}_0^{\text{tl}} + p\hat{A}$ mit $q = a^2$, $p = 2\alpha\beta \sin \gamma$. Für den Dichteoperator nach j Drehungen erhält man dann mit (2.20)

$$\begin{aligned} \hat{\rho}' &= \frac{1}{2} \hat{1} + e^{-\frac{ja^2\sigma^2}{2}} \hat{\rho}_0^{\text{tl}} + \frac{p}{a^2} (e^{-\frac{ja^2\sigma^2}{2}} - 1) \hat{A} \\ &= \frac{1}{2} \hat{1} + e^{-\frac{ja^2\sigma^2}{2}} \left(\left(\frac{1}{2} - \alpha^2 \right) \hat{\sigma}_z + \alpha\beta \hat{\sigma}_x \cos \gamma \right) - \alpha\beta \hat{\sigma}_y \sin \gamma \end{aligned} \quad (2.29)$$

Dieser Dichteoperator hat dieselben Eigenwerte wie $\hat{\rho}$. Die Eigenwerte sind

$$\rho_{1/2} = \frac{1}{2} \left(1 \pm e^{-\frac{ja^2\sigma^2}{2}} \sqrt{1 + 4\alpha^2\beta^2 (e^{ja^2\sigma^2} - 1) \sin^2 \gamma} \right) \quad (2.30)$$

Insbesondere erhält man für eine rein reelle Überlagerung, wie sie im folgenden Kapitel beim Grover-Algorithmus auftreten wird, mit

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (2.31)$$

2.6. Beispiel einer zufälligen Ein-Qubit-Operation

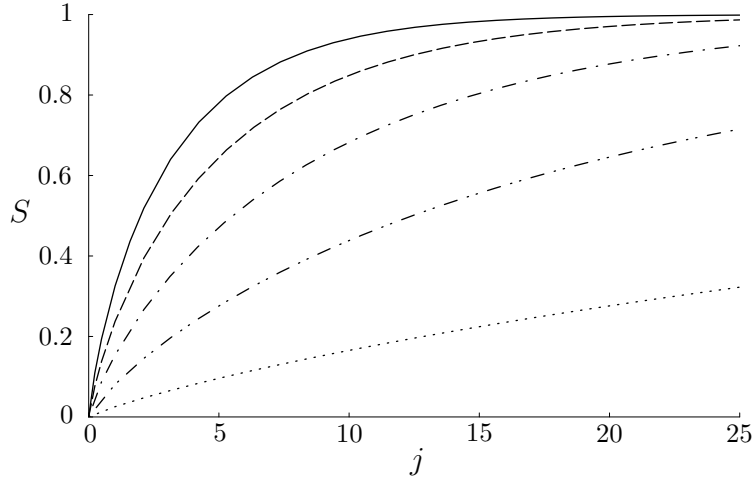


Abb. 2.1.: $S(j)$ (in Einheiten Bit) für zufällige Ein-Qubit-Operation mit $a = 1$. Die Kurven entsprechen $\sigma = 0.1$ (.....), 0.2 (-...-), 0.3 (- - -), 0.4 (- - - -), 0.5 (—)

also mit $\gamma = 0$ oder π , dass $p = 0$ ist und $\hat{\rho}_0^{\text{tl}} = (\frac{1}{2} - \alpha^2)\hat{\sigma}_z + \alpha\beta\hat{\sigma}_x$, mit den Eigenwerten $\rho_{0,1/2}^{\text{tl}} = \pm\frac{1}{2}$. Aus Gleichung (2.21) oder (2.30) erhält man in diesem Fall für die Eigenwerte von $\hat{\rho}$

$$\rho_{1/2} = \frac{1}{2}(1 \pm e^{-\frac{j\alpha^2\sigma^2}{2}}) \quad (2.32)$$

Die sich daraus ergebende Entropie ist in Abb. 2.1 gezeigt. Die Entropie nimmt also bei wiederholter Anwendung der zufälligen Drehung ständig zu. Das System nähert sich dabei dem total gemischten Zustand mit $S = 1$ Bit an. Damit geht auch jede Information über den Ausgangszustand verloren. Für stärkere Schwankungen, also größere Standardabweichung σ , verläuft diese Annäherung an den total gemischten Zustand schneller.

Gemischter Ausgangszustand

Ferner soll ein gemischter Ausgangszustand der Form

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{2}\hat{1} + \frac{1}{2}\epsilon\hat{\sigma}_z \quad (2.33)$$

betrachtet werden. Dieser Zustand tritt in einem Spinsystem als thermischer Gleichgewichtszustand auf. Für $\hat{\rho}_0^{\text{tl}}$ erhält man dann $\hat{\rho}_0^{\text{tl}} = \frac{1}{2}\epsilon\hat{\sigma}_z$ mit den Eigenwerten $\rho_{0,1/2}^{\text{tl}} = \pm\frac{1}{2}\epsilon$. Damit ist $q = a^2$ und $p = 0$. Mit (2.21) folgt dann

$$\rho_{1/2} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \epsilon e^{-\frac{j\alpha^2\sigma^2}{2}} \right) \quad (2.34)$$

2. Ungenaue Operationen: Externe Parameter-Schwankungen

Das Verhalten ist prinzipiell dasselbe wie beim kohärenten reellen Ausgangszustand (Abb. 2.1) mit dem Unterschied, dass schon am Anfang eine endliche Entropie vorhanden ist.

2.7. Beispiel einer zufälligen Zwei-Qubit-Operation

Als zweites Beispiel soll eine Zwei-Qubit-Operation betrachtet werden, die aus hintereinander angewandten CNot-Operationen und Drehungen besteht. Dabei soll es sich bei der Drehung wieder um eine Zufalls-Drehung um die y -Achse handeln. Die beiden Operationen haben die folgenden Darstellungen

$$\begin{aligned}\hat{U}(\phi) &= \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \otimes \hat{1} \\ &= (\hat{1} \cos \phi + i \hat{\sigma}_y \sin \phi) \otimes \hat{1}\end{aligned}\quad (2.35)$$

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\text{CNot}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \{ (\hat{1} - \hat{\sigma}_z) \otimes \hat{1} + (\hat{1} + \hat{\sigma}_z) \otimes \hat{\sigma}_x \}\end{aligned}\quad (2.36)$$

Man erhält dann für den aus beiden Operationen zusammengesetzten Operator

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\text{CNot}} \hat{U}(\phi) &= \frac{1}{2} \{ (\hat{1} \cos \phi + i \hat{\sigma}_y \sin \phi - \hat{\sigma}_z \cos \phi - \hat{\sigma}_x \sin \phi) \otimes \hat{1} \\ &\quad + (\hat{1} \cos \phi + i \hat{\sigma}_y \sin \phi + \hat{\sigma}_z \cos \phi + \hat{\sigma}_x \sin \phi) \otimes \hat{\sigma}_x \}\end{aligned}\quad (2.37)$$

Dieser Operator soll nun j -mal hintereinander auf das Zwei-Spin-System angewandt werden, wobei der Winkel ϕ mit einem Fehler behaftet sein soll. Die Rechnung vereinfacht sich beträchtlich, wenn man den aus zwei dieser Operationen zusammengesetzten Operator \hat{U}_d betrachtet.

$$\hat{U}_d(\phi_1, \phi_2) = \hat{U}_{\text{CNot}} \hat{U}(\phi_2) \hat{U}_{\text{CNot}} \hat{U}(\phi_1)\quad (2.38)$$

Man erhält

$$\hat{U}_d(\phi_1, \phi_2) = e^{i \hat{\sigma}_y \otimes (\phi_1 \hat{1} + \phi_2 \hat{\sigma}_x)}\quad (2.39)$$

Für diesen Operator gilt folgende Beziehung

$$\begin{aligned}\hat{U}_d(\phi_3, \phi_4) \hat{U}_d(\phi_1, \phi_2) &= e^{i \hat{\sigma}_y \otimes (\phi_3 \hat{1} + \phi_4 \hat{\sigma}_x)} e^{i \hat{\sigma}_y \otimes (\phi_1 \hat{1} + \phi_2 \hat{\sigma}_x)} \\ &= e^{i \hat{\sigma}_y \otimes ((\phi_1 + \phi_3) \hat{1} + (\phi_2 + \phi_4) \hat{\sigma}_x)} \\ &= \hat{U}_d(\phi_1 + \phi_3, \phi_2 + \phi_4)\end{aligned}\quad (2.40)$$

Somit kann das Verhalten für $2j$ Anwendungen wieder analog zu Satz 2.2 auf das Verhalten für $j = 2$ zurückgeführt werden. Jetzt soll eine fehlerhafte Drehung

2.7. Beispiel einer zufälligen Zwei-Qubit-Operation

um den Sollwinkel ϕ_0 betrachtet werden, mit $\phi_1 = \phi_0 + \delta'$ und $\phi_2 = \phi_0 + \delta''$, dabei sind δ' und δ'' wieder normalverteilte Zufallsvariable. Damit erhält man den NDP-Operator

$$\begin{aligned}
 \hat{U}_2(\delta', \delta'') &= \hat{U}_{\text{CNot}} \hat{U}(\phi_0 + \delta'') \hat{U}_{\text{CNot}} \hat{U}(\phi_0 + \delta') \\
 &= \hat{U}_d(\phi_0 + \delta', \phi_0 + \delta'') \\
 &= \hat{U}_d(\phi_0, \phi_0) \hat{U}_d(\delta', \delta'') \\
 &= \hat{U}_0 e^{i \hat{\sigma}_y \otimes (\delta' \hat{1} + \delta'' \hat{\sigma}_x)} \\
 &= \hat{U}_0 e^{i \delta' \hat{\sigma}_y \otimes \hat{1}} e^{i \delta'' \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_x}
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

mit

$$\hat{U}_0 = e^{i \phi_0 \hat{\sigma}_y \otimes (\hat{1} + \hat{\sigma}_x)} \tag{2.42}$$

Man erhält ganz analog zu (2.13)

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{4} \hat{1} + \iint_{-\infty}^{\infty} d\delta' d\delta'' w(\delta') w(\delta'') e^{-i \delta'' \hat{A}''} e^{-i \delta' \hat{A}'} \hat{\rho}_0^{\text{tl}} e^{i \delta' \hat{A}'} e^{i \delta'' \hat{A}''} \tag{2.43}$$

mit $\hat{A}' = -\hat{\sigma}_y \otimes \hat{1}$ und $\hat{A}'' = -\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_x$.

Nun kann man sich wieder eine rekursive Eigenschaft der Kommutatoren zunutze machen, es gilt nämlich

Hilfssatz 2.5 Für zwei Operatoren $\hat{A}_{ij} = a \hat{\sigma}_i \otimes \hat{\sigma}_j$ und $\hat{B} = \sum_{k,l=0}^3 b_{kl} \hat{\sigma}_k \otimes \hat{\sigma}_l$ gilt

$$[\hat{A}_{ij}, [\hat{A}_{ij}, [\hat{A}_{ij}, \hat{B}]]] = 4a^2 [\hat{A}_{ij}, \hat{B}] \tag{2.44}$$

für beliebige $i, j = 0, \dots, 3$ und b_{kl} .

Wegen Satz 2.5 folgt mit zweimaliger Anwendung von (A.1)

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{4} \hat{1} + \hat{\rho}_0^{\text{tl}} + \frac{1}{4} (e^{-2\sigma^2} - 1) (\hat{Q}' + \hat{Q}'') + \frac{1}{16} (e^{-2\sigma^2} - 1)^2 \hat{Q}''' \tag{2.45}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \hat{Q}' &= [\hat{A}', [\hat{A}', \hat{\rho}_0^{\text{tl}}]] \\
 \hat{Q}'' &= [\hat{A}'', [\hat{A}'', \hat{\rho}_0^{\text{tl}}]] \\
 \hat{Q}''' &= [\hat{A}'', [\hat{A}'', \hat{Q}']] = [\hat{A}', [\hat{A}', \hat{Q}']]
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

Als Beispiel soll als Anfangszustand ein diagonales $\hat{\rho}_0$ betrachtet werden, also

$$\hat{\rho}_0^{\text{tl}} = \frac{1}{4} (\lambda_1 \hat{\sigma}_z \otimes \hat{1} + \lambda_2 \hat{1} \otimes \hat{\sigma}_z + \lambda_{12} \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z) \tag{2.47}$$

2. Ungenaue Operationen: Externe Parameter-Schwankungen

Daraus folgt für den Dichteoperator

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{4} \left\{ \hat{1} + e^{-2\sigma^2} \left(e^{-2\sigma^2} \lambda_1 \hat{\sigma}_z \otimes \hat{1} + \lambda_2 \hat{1} \otimes \hat{\sigma}_z + \lambda_{12} \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z \right) \right\} \quad (2.48)$$

Für den speziellen Anfangszustand $|\psi\rangle = |00\rangle \equiv (1, 0, 0, 0)$, und damit $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = -1$, $\lambda_{12} = 1$, erhält man die Eigenwerte der Dichtematrix nach j -maliger Anwendung von \hat{U}_2 , also nach $2j$ -maliger Anwendung von $\hat{U}_{\text{CNot}}\hat{U}(\phi_0)$ mit fehlerhaftem ϕ_0 zu

$$\begin{aligned} \rho_\nu &= \frac{1}{4} \left(\left(1 + e^{-2j\sigma^2}\right)^2, \left(1 - e^{-2j\sigma^2}\right)^2, 1 - e^{-4j\sigma^2}, 1 - e^{-4j\sigma^2} \right) \\ &= (\lambda_1^2, \lambda_2^2, \lambda_1\lambda_2, \lambda_1\lambda_2) \end{aligned} \quad (2.49)$$

mit

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2} \left(1 \pm e^{-2j\sigma^2} \right) \quad (2.50)$$

Daraus erhält man mit (2.6) die Entropie

$$\begin{aligned} S &= -2(\lambda_1 + \lambda_2) \{ \lambda_1 \log_2 \lambda_1 + \lambda_2 \log_2 \lambda_2 \} \\ &= -2 \sum_{\nu=1}^2 \lambda_\nu \log_2 \lambda_\nu \end{aligned} \quad (2.51)$$

Die Entropie hat damit die gleiche Form wie bei dem Beispiel der fehlerhaften Drehung bei einem Spin (vergleiche dazu (2.32)). Das System geht für viele Wiederholungen der Zwei-Qubit-Operation also wieder gegen den total gemischten Zustand $S = 2$. Dabei führt die Anwendung der CNot-Operation dazu, dass sich der Fehler, den die fehlerhafte Drehung direkt nur auf einen der beiden Spins ausübt, auch auf den anderen Spin überträgt.

2.8. Zusammenfassung

Ein Quantenalgorithmus ist im Prinzip nichts anderes als eine Folge von Kontrolloperationen, die auf ein Quantensystem wirken. Wenn bei diesen Operationen ein Kontrollmangel auftritt, wie zufällige Schwankungen in den Parametern, dann führt das zu einer Entropieerhöhung des Systems.

Wenn man einfache Ein-Qubit-Operatoren, wie unitäre Drehungen um fehlerhafte Drehwinkel, wiederholt auf ein Qubit anwendet, dann geht der Zustand des Systems schließlich in den total gemischten Zustand über. Zwei-Qubit-Operationen, die zusätzlich angewendet werden, führen dazu, dass sich die Fehler auch auf die restlichen Qubits ausbreiten. Das wurde an einem Zwei-Qubit-System demonstriert.

Man kann diese wiederholte Anwendung einer Operation (Iteration) als ein sehr vereinfachtes Modell für einen sinnvollen Algorithmus betrachten. Da der Zustand

2.8. Zusammenfassung

maximaler Entropie keinerlei Information enthält und damit auch kein sinnvolles Resultat eines Algorithmus darstellen kann, folgt daraus, dass Kontrollmangel dieser Art ein ernsthaftes Problem vor allem für längere Rechnungen darstellt. Im folgenden Kapitel sollen diese Überlegungen auf einen realistischeren Algorithmus, nämlich den Such-Algorithmus von Grover, erweitert werden.

3. Externe Kontrollfehler: Einfluss auf den Grover-Algorithmus

3.1. Einleitung

Der Hauptgrund, weswegen Quantencomputer so interessant sind, ist die Möglichkeit völlig neuer Algorithmen. In den letzten Jahren hat sich erwiesen, dass Computer nicht unabhängig von der Art ihrer Implementierung sind. Vielmehr wird durch das physikalische System mitbestimmt, was der Computer leisten kann. Dies deutet sich schon beim klassischen Computer im Unterschied zwischen analogen und digitalen Rechnern an. Einschneidend sind die Unterschiede, wenn man von klassischen Systemen zu quantenmechanischen übergeht. Die Gesetze der Quantenmechanik eröffnen Möglichkeiten für neue Algorithmen, die einen erheblichen Effizienz-Vorteil gegenüber den entsprechenden klassischen Algorithmen mit sich bringen können. Probleme, die auf einem klassischen Computer praktisch unlösbar sind, könnten damit irgendwann einmal mit Quantencomputern gemeistert werden.

Vor allem zwei Algorithmen haben neue Perspektiven eröffnet. Der eine davon ist Shors Algorithmus zur Primfaktorenzerlegung [13], der andere Grovers Algorithmus zur Suche in einem unsortierten Datensatz [14]. Shors Algorithmus löst durch einen exponentiellen Geschwindigkeitsgewinn das in der klassischen Theorie harte Problem der Faktorisierung von Zahlen.

Der Grover-Algorithmus nutzt die Superposition von Quantenzuständen aus, um einen ausgezeichneten Zustand aus einer Menge von n Zuständen zu finden. Das lässt sich vergleichen mit der Suche in einem unsortierten Telefonbuch oder mit der Suche nach dem zu einer Telefonnummer gehörenden Namen. Im klassischen Fall braucht man im Mittel etwa $n/2$ Versuche, um zu einem Ergebnis zu kommen. Grover konnte zeigen, dass der von ihm vorgeschlagene Algorithmus in $\mathcal{O}(\sqrt{n})$ Schritten zum Ziel führt. Dabei verwendet der Algorithmus nur einfache Operationen, namentlich Walsh-Hadamard-Transformationen und bedingte Phaseninversionen. Boyer et al. [15] konnten zeigen, dass man innerhalb $\pi/4\sqrt{n}$ Schritten praktisch mit Sicherheit den gesuchten Zustand findet. Man erreicht damit also nur eine polynomiale Verbesserung, und somit keine Reduktion der Komplexitätsklasse wie beim Faktorisierungsalgorithmus von Shor. Die Effizienzsteigerung

könnte aber ausreichend sein, um bestimmte Probleme leichter lösen zu können.

Eine mögliche Anwendung des Grover-Algorithmus liegt in der Kryptographie [16]. Verallgemeinerungen des Algorithmus könnten zu weiteren Anwendungen führen. Grover konnte zeigen, dass anstelle der Walsh-Hadamard-Transformation beliebige unitäre Transformationen verwendet werden können [17]. So könnten auf spezielle Probleme zugeschnittene Algorithmen entworfen werden. Andere Verallgemeinerungen sind die Suche nach mehreren Objekten [15, 18], die Verwendung beliebiger Anfangszustände [19] und die Benutzung des Algorithmus zur Präparation beliebiger Superpositionszustände [20].

Da der Algorithmus relativ einfach ist, dient er auch als „Paradepferd“, um Prinzipien der Quanteninformationsverarbeitung bei experimentellen Realisationen mit wenigen Qubits zu untersuchen und zu demonstrieren. So gibt es verschiedene Implementierungen mit zwei Qubits [21, 22, 23] und, seit kurzem, auch mit drei Qubits [24]. Das Orakel, d. h. die Prozedur, die überprüft, ob ein gegebener Zustand mit dem gesuchten Zustand übereinstimmt, wurde bisher jedoch nicht mit implementiert.

Grover hat auch vermutet, dass man die verwendeten Phaseninversionen durch Phasendrehungen um beliebige Winkel ersetzen könnte [17]. Dabei sollte sich der Algorithmus nur verlangsamen. Long et al. konnten aber zeigen, dass allgemeine Winkel nur verwendet werden können, solange sie eine „phase matching“-Bedingung erfüllen [25]. Eine Verletzung dieser Bedingung kann zum Beispiel durch Gatteroperationen verursacht werden, die mit Fehlern behaftet sind.

In einem tatsächlichen physikalischen System ist es nicht möglich, die Operationen mit unendlich hoher Genauigkeit auszuführen. Bei Implementierungen wie NMR oder Ionenfallen werden Algorithmen durch eine Folgen von Radio- oder Laserpulsen realisiert. Dabei können Fehler auftreten, z. B. in der Pulslänge, was zu Über- oder Unter-Drehungen führt. Die Stabilität von Quantenalgorithmen gegenüber Kontrollfehlern wurde bisher nur vereinzelt untersucht. Numerische Simulationen von Ionenfallen-Quantencomputern weisen darauf hin, dass die Quanten-Fouriertransformation stabil gegenüber kleinen experimentellen Unsicherheiten ist [1], wohingegen der Faktorisierungs-Algorithmus nach Shor schon bei Systemen mit verhältnismäßig wenigen Qubits zusammenbricht [26].

Im Folgenden soll untersucht werden, wie sich der Grover-Algorithmus bei solchen fehlerhaften Operationen verhält. Insbesondere soll geklärt werden, wie stark der Algorithmus durch Kontrollfehler beeinträchtigt wird. Große Fehler können zu einem vollständigen Zusammenbruch des Algorithmus führen. Für die tolerierbaren Fehler sollen obere Schranken angegeben werden und deren Skalenverhalten mit n . Dazu werden zwei Fehlermodelle betrachtet, beide jeweils mit systematischen oder zufälligen Fehlern.

3.2. Grundlagen des Such-Algorithmus

Der Such-Algorithmus, wie er zuerst von Grover angegeben wurde, funktioniert folgendermaßen. Man hat ein System mit n orthogonalen Zuständen $|i\rangle$, z. B. N Qubits mit $n = 2^N$ Zuständen, die durch N -Bit-Strings repräsentiert werden. Der ausgezeichnete Zustand, nach dem gesucht wird, sei $|i_0\rangle$. Die Abfrage, ob ein bestimmter Zustand der gesuchte ist, geschieht durch ein „Orakel“. Das Orakel ist eine Funktion $f(|i\rangle)$, die den Wert $f = 1$ liefert, wenn $i = i_0$ ist, und den Wert $f = 0$ für alle anderen Zustände. Sie soll durch eine „black box“ realisiert sein, die für die Auswertung genau einen Zeitschritt benötigt. Der Algorithmus besteht aus der mehrfachen Anwendung einer unitären Operation und einer anschließenden Messung. Nach der Messung liegt dann mit hoher Wahrscheinlichkeit der gesuchte Zustand vor. Der Algorithmus wirkt daher wie ein „Amplituden-Verstärker“ für den gesuchten Zustand.

Der Algorithmus besteht aus folgenden Schritten:

1. Initialisierung des Systems in einer gleichgewichteten Superposition aller Zustände. Wenn sich das System zu Beginn im Grundzustand $|000\dots\rangle$ befindet, kann die Initialisierung durch Walsh-Hadamard-Transformationen auf alle Qubits realisiert werden. Man erhält dann den Zustand

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n |i\rangle \quad (3.1)$$

2. j -malige Wiederholung der folgenden Schritte a) und b). Dabei muss j geeignet gewählt werden.

- a) Inversion: Werte das Orakel aus; wenn der Zustand $|i_0\rangle$ vorliegt, also $f = 1$, rotiere die Phase um π . Das bedeutet, dass der Zustand $|i_0\rangle$ in $-|i_0\rangle$ übergeht, die anderen Zustände bleiben unverändert. Dieser Operation entspricht der Operator

$$\begin{aligned} \hat{I}_{i_0} &= -|i_0\rangle\langle i_0| + \sum_{i \neq i_0} |i\rangle\langle i| \\ &= \hat{1} - 2|i_0\rangle\langle i_0| \end{aligned} \quad (3.2)$$

- b) Diffusion: Wende die Diffusionstransformation \hat{D} an, mit den Matrixelementen

$$\hat{D}_{ij} = \frac{2}{n} - \delta_{ij} \quad (3.3)$$

Diese Transformation kann durch zwei Walsh-Hadamard-Transformationen und eine Phaseninversion realisiert werden. Sie bewirkt eine „inversion about average“.

3.2. Grundlagen des Such-Algorithmus

3. Messung des resultierenden Zustands

Der Zustand des Systems nach j Schritten $|\psi_j\rangle = (\hat{D}\hat{I}_{i_0})^j |\psi_0\rangle$ kann geschrieben werden als

$$|\psi_j\rangle = B_j |i_0\rangle + A_j \frac{1}{\sqrt{n-1}} \sum_{i \neq i_0}^n |i\rangle \quad (3.4)$$

mit $B_0 = \frac{1}{\sqrt{n}}$ und $A_0 = \sqrt{\frac{n-1}{n}}$. Der Grover-Algorithmus lässt sich also in einem effektiv zweidimensionalen Raum darstellen. Wiederholte Anwendung von $\hat{D}\hat{I}_{i_0}$ auf $|\psi_0\rangle$ führt auf die Rekursionsformel

$$\begin{pmatrix} B_{j+1} \\ A_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{n} & \frac{2}{n}\sqrt{n-1} \\ -\frac{2}{n}\sqrt{n-1} & 1 - \frac{2}{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_j \\ A_j \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Man kann einen effektiven Drehwinkel ϕ einführen mit

$$\cos \phi = 1 - \frac{2}{n} \quad (3.6)$$

Daraus folgt $\sin \phi = \frac{2}{n}\sqrt{n-1}$ und man erhält

$$\begin{pmatrix} B_{j+1} \\ A_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_j \\ A_j \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} B_j \\ A_j \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}^j \begin{pmatrix} B_0 \\ A_0 \end{pmatrix} \\ &= \mathbb{T}^j \begin{pmatrix} B_0 \\ A_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.8)$$

\mathbb{T} stellt eine gewöhnliche Drehmatrix in \mathbb{R}^2 dar. Die j -fache Anwendung führt also zu einer Drehung um den Drehwinkel $j\phi$. Es folgt dann

$$\begin{aligned} B_j &= B_0 \cos j\phi + A_0 \sin j\phi \\ &= \sin(j\phi + \varphi) \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \tan \varphi &= \frac{B_0}{A_0} = \frac{1}{\sqrt{n-1}} \\ &= \frac{1 - \cos \phi}{\sin \phi} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Mit $\tan \frac{x}{2} = \frac{1 - \cos x}{\sin x}$ [12] folgt $\varphi = \phi/2$, also erhält man für B_j

$$B_j = \sin\left(\left(j + \frac{1}{2}\right)\phi\right) \quad (3.11)$$

3. Externe Kontrollfehler: Einfluss auf den Grover-Algorithmus

Die Erfolgswahrscheinlichkeit des Algorithmus, P , ist die Wahrscheinlichkeit, bei der Messung nach j Schritten den Zustand $|i_0\rangle$ zu finden.

$$\begin{aligned} P &= |\langle i_0 | \psi_j \rangle|^2 \\ &= |B_j|^2 \end{aligned} \quad (3.12)$$

P wird also maximal für maximales B_j . Um mit möglichst hoher Wahrscheinlichkeit den gesuchten Zustand zu finden, muss also j so gewählt werden, dass B_j möglichst groß wird. Das früheste Maximum $B_j = 1$ liegt bei $(j + \frac{1}{2})\phi = \pi/2$, also gilt für die ideale Anzahl von Schritten

$$j_{id} = \frac{\pi}{2\phi} - \frac{1}{2} \quad (3.13)$$

und für großes n

$$j_{id} \approx \frac{\pi}{4} \sqrt{n} \quad (3.14)$$

Wenn man den Grover-Operator j_{id} -mal wiederholt, findet man mit Sicherheit den gesuchten Zustand. Man benötigt also $\mathcal{O}(\sqrt{n})$ Schritte für die Suche. Allerdings können natürlich nur ganze Zahlen von Schritten durchgeführt werden, j_{id} muss also auf die nächste ganze Zahl gerundet werden. Die Fehlerwahrscheinlichkeit, die dadurch entsteht, ist aber kleiner als $1/n$ [15] und kann für große Systeme getrost vernachlässigt werden.

3.3. Fehlerhafte Operationen

Es soll nun angenommen werden, dass die Drehmatrix \mathbb{T} in (3.8) ungenau sei, so dass sie tatsächlich von einem weiteren Parameter δ abhängt, der den Fehler beschreibt:

$$\begin{pmatrix} B_j \\ A_j \end{pmatrix} = \mathbb{T}^j(\delta) \begin{pmatrix} B_0 \\ A_0 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Das kann durch fehlerhafte Operationen während der Ausführung der Iterationsschritte verursacht werden. Damit wird sich auch die Erfolgswahrscheinlichkeit für die Suche ändern.

Es sollen zwei grundsätzlich unterschiedliche Fälle betrachtet werden:

- δ beschreibt einen systematischen Fehler, ist also konstant für alle Iterationsschritte. P ist dann eine Funktion von δ . Dieser Fall tritt z. B. bei ungenauer Justierung/Eichung von Komponenten des experimentellen Aufbaus auf.
- δ beschreibt einen zufälligen Fehler oder Rauschen, nimmt also für jeden Iterationsschritt einen durch eine bestimmte Wahrscheinlichkeitsverteilung

3.4. Fehlermodell 1 („Ungenauere Drehung“)

gegebenen Wert an. Dabei wird im Folgenden immer eine Normalverteilung mit Standardabweichung σ angenommen. Der Erwartungswert soll 0 sein, d. h. gleichzeitig vorliegende systematische Fehler sollen nicht betrachtet werden. Die Erfolgswahrscheinlichkeit muss dann durch den Ensemble-Mittelwert über alle Fehler-Realisierungen ersetzt werden und wird von den Parametern der Verteilung abhängen, hier von der Standardabweichung.

Man wird vermuten, dass die Fehler zu einer geringeren Erfolgswahrscheinlichkeit führen. Wenn man fordert, dass der Algorithmus mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit, sagen wir mit $P = 0.9$, zum Erfolg führen soll, so wird es einen kritischen Fehler geben, bis zu dem diese Bedingung erfüllt ist. Für größere Fehler versagt dann der Algorithmus in dem Sinne, dass er nur mit einer kleineren Wahrscheinlichkeit zum Erfolg führt.

Definition 3.1 (kritischer Fehler) *Die Erfolgswahrscheinlichkeit P sei von einem Fehlerparameter η abhängig (systematischem Fehler δ oder Standardabweichung σ bei zufälligem Fehler). Gegeben sei eine Wahrscheinlichkeitsschwelle P_{cut} . Das maximale η_0 , für das gilt*

$$P(\eta) \geq P_{cut} \quad \text{für alle } \eta \leq \eta_0 \quad (3.16)$$

heißt tolerierbarer oder kritischer Fehler η_{crit} .

Für monoton abnehmendes $P(\eta) = 1 - f(\eta)$ und $P_{cut} \equiv 1 - \Delta$ erhält man η_{crit} aus der Bedingung

$$f(\eta_{crit}) = \Delta \quad (3.17)$$

Im Folgenden sollen zwei konkrete Fehlermodelle betrachtet werden. Das erste Modell hat den Vorteil, dass es analytisch leichter zu handhaben ist. Das zweite Modell konnte für den Fall von zufälligen Fehlern nur numerisch untersucht werden, ist dafür aber physikalisch direkter begründbar.

3.4. Fehlermodell 1 („Ungenauere Drehung“)

Dieses Modell geht davon aus, dass die Auswirkungen von fehlerhaften Operationen so beschrieben werden können, als ob in (3.8) ein ungenauer Drehwinkel ϕ vorliegt, so dass

$$\begin{aligned} \mathbb{T}(\delta) &= \begin{pmatrix} \cos(\phi + \delta) & \sin(\phi + \delta) \\ -\sin(\phi + \delta) & \cos(\phi + \delta) \end{pmatrix} \\ &= e^{-i(\phi + \delta)\sigma_y} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Dieses Modell hat den Vorteil, analytisch relativ einfach gelöst werden zu können. Es ist allerdings physikalisch nicht direkt begründbar. So wird implizit davon ausgegangen, dass die effektiv zweidimensionale Beschreibung immer noch gültig ist. Das bedeutet, dass alle Zustände $|i\rangle \neq |i_0\rangle$ den gleichen Fehler erfahren. Diese Annahme ist sicherlich eine Idealisierung.

3. Externe Kontrollfehler: Einfluss auf den Grover-Algorithmus

3.4.1. Systematischer Fehler

Zunächst wird angenommen, dass es sich bei dem Fehler um eine systematische Abweichung handelt, der Fehler δ ist also eine konstante Größe für alle Iterationsschritte. Man kann dann die obige Rechnung größtenteils unverändert übernehmen und erhält für B_j

$$\begin{aligned} B_j &= \sin\left(j(\phi + \delta) + \frac{1}{2}\phi\right) \\ &= \sin\left(\left(j + \frac{1}{2}\right)\phi + j\delta\right) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die maximale Wahrscheinlichkeit, die erreicht werden kann, ist immer noch $P = 1$. Sie tritt aber nicht mehr nach j_{id} Schritten auf. Wenn also trotz des Fehlers nach j_{id} Schritten gemessen wird, so reduziert sich die Erfolgswahrscheinlichkeit. Mit (3.13) ergibt sich

$$P = \cos^2(j_{id}\delta) \quad (3.20)$$

$$P \approx \cos^2\left(\frac{\pi}{4}\sqrt{n}\delta\right) \quad \text{für große } n \quad (3.21)$$

Für große n ist P folglich eine Funktion von $\sqrt{n}\delta$. Um also eine vorgegebene konstante Wahrscheinlichkeit zu erreichen, ist mit wachsendem n ein kleinerer Fehler δ erforderlich. Es folgt, dass δ_{crit} wie $n^{-1/2}$ skaliert. Um ein P nahe 1 zu erreichen, muss $\sqrt{n}\delta$ klein sein. Dann gilt $P \approx 1 - \frac{\pi^2 n \delta^2}{16}$, und damit

$$\delta_{crit} \approx \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{\Delta}{n}} \quad (3.22)$$

3.4.2. Zufälliger Fehler

Jetzt sollen die Fehler zufällig um den Sollwert verteilt sein. Es wird also ein normalverteiltes δ angenommen, wobei der Erwartungswert 0 sein soll. $\mathbb{T}(\delta)$ ist also eine NDP-Matrix. Es können hier somit die Überlegungen aus Kapitel 2.6 übernommen werden. Aus (3.18) folgt dabei $\mathbf{A} = \sigma_y$ und $\mathbf{U}_0 = \mathbb{T}(0)$. Die Parameter $\alpha = B_0$ und $\beta = A_0$ sind beide reell und positiv, es folgt also $\gamma = 0$. Mit den Parametern $a = 2$, $q = 4$, $p = 0$ und Gleichung (2.29) folgt

$$\begin{aligned} \rho' &= \frac{1}{2}\mathbf{1} + e^{-2j\sigma^2} \left(\left(\frac{1}{2} - B_0^2 \right) \sigma_z + A_0 B_0 \sigma_x \right) \\ &= \frac{1}{2}\mathbf{1} + \frac{1}{2} e^{-2j\sigma^2} \left(\frac{n-2}{n} \sigma_z + \frac{2}{n} \sqrt{n-1} \sigma_x \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\mathbf{1} + e^{-2j\sigma^2} (\sigma_z \cos \phi + \sigma_x \sin \phi) \right) \\ \rho &= \mathbb{T}^j(0) \rho' (\mathbb{T}^j(0))^\dagger \end{aligned} \quad (3.23)$$

3.4. Fehlermodell 1 („Ungenauere Drehung“)

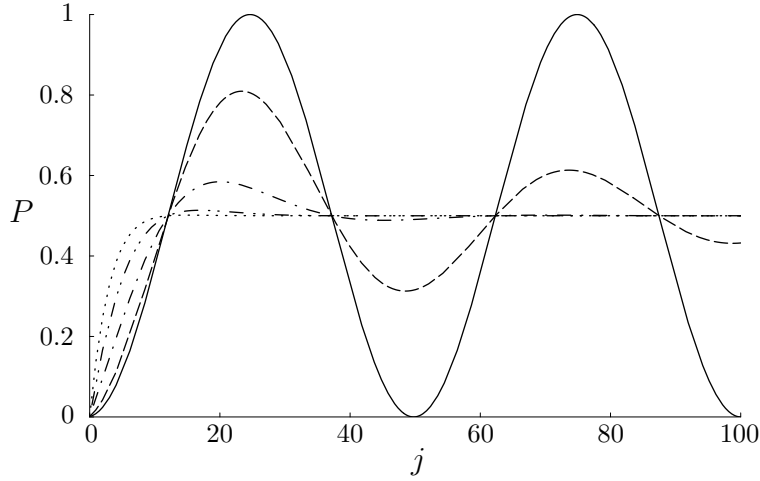


Abb. 3.1.: $P(j)$ für Grover-Algorithmus mit Zufalls-Drehungen (Fehlermodell 1), $N = 10$ Qubits. Die Kurven entsprechen $\sigma = 0$ (—), 0.1 (---), 0.2 (-·-), 0.3 (- - -), 0.4 (····)

Mit

$$\begin{aligned} \mathbb{T}^j(0) &= 1 \cos(j\phi) - i \sigma_y \sin(j\phi) \\ \mathbb{T}^j(0) \sigma_z (\mathbb{T}^j(0))^\dagger &= \sigma_z \cos(2j\phi) + \sigma_x \sin(2j\phi) \\ \mathbb{T}^j(0) \sigma_x (\mathbb{T}^j(0))^\dagger &= \sigma_x \cos(2j\phi) - \sigma_z \sin(2j\phi) \end{aligned} \quad (3.24)$$

folgt dann

$$\rho = \frac{1}{2} \left\{ 1 + e^{-2j\sigma^2} \left(\sigma_z \cos((2j+1)\phi) + \sigma_x \sin((2j+1)\phi) \right) \right\} \quad (3.25)$$

und mit $P = |B_j|^2 = \rho_{11}$ ergibt sich

$$P = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-2j\sigma^2} \cos((2j+1)\phi) \right) \quad (3.26)$$

$P(j)$ für verschiedene σ ist aufgetragen in Abbildung 3.1. Im Gegensatz zum Fall von systematischen Fehlern nimmt der maximale Wert von P mit steigendem σ ab. Zusätzlich verschiebt sich das Maximum von j_{id} weg, allerdings nicht viel für kleine σ .

Wenn nach j_{id} Schritten gemessen wird, hat man die Erfolgswahrscheinlichkeit

$$P = \frac{1}{2} \left(1 + e^{-2j_{id}\sigma^2} \right) \quad (3.27)$$

$$P \approx \frac{1}{2} \left(1 + e^{-\frac{\pi}{2} \sqrt{n} \sigma^2} \right) \quad \text{für große } n \quad (3.28)$$

3. Externe Kontrollfehler: Einfluss auf den Grover-Algorithmus

Für große n ist P also Funktion von $\sqrt{n}\sigma^2$, d. h. σ_{crit} skaliert wie $n^{-1/4}$. Für kleine $\sqrt{n}\sigma^2$ gilt $P \approx 1 - \frac{\pi}{4}\sqrt{n}\sigma^2$ und damit

$$\sigma_{crit} \approx 2\sqrt{\frac{\Delta}{\pi}} n^{-1/4} \quad (3.29)$$

Für große σ geht die Erfolgswahrscheinlichkeit ziemlich schnell gegen $1/2$. Das ist eine Folge des Modells und entspricht der effektiv zweidimensionalen Behandlung. Für ein tatsächliches System, bei dem alle Zustände verschiedenen Zufallsparametern ausgesetzt sind, erwartet man als Grenzfall eine Gleichverteilung in einem viel größeren Raum und damit eine viel kleinere Erfolgswahrscheinlichkeit. Dieses Fehlermodell ist also sehr optimistisch.

3.5. Fehlermodell 2 („Ungenauere Phaseninversion“)

Ausgangspunkt für dieses Fehlermodell ist der von Long et al. [27] vorgestellte verallgemeinerte Grover-Algorithmus. Dabei hat man anstelle der Phaseninversion des ausgezeichneten Zustands eine Phasendrehung um einen allgemeinen Winkel. Dieses Modell verletzt die „phase matching“-Bedingung und führt zu einer Beeinträchtigung des Algorithmus. Für eine Phasendrehung um $\pi + \delta$ erhält man den Inversionsoperator zu

$$\hat{I}_{i_0} = -e^{i\delta} |i_0\rangle \langle i_0| + \sum_{i \neq i_0}^n |i\rangle \langle i| \quad (3.30)$$

Für T folgt dann

$$T(\delta) = \begin{pmatrix} e^{i\delta} \cos \phi & \sin \phi \\ -e^{i\delta} \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

Dieses Fehlermodell ist physikalisch leicht einzusehen, geht man davon aus, dass alle Operationen bis auf die Phaseninversion des markierten Zustands fehlerfrei realisiert werden können.

3.5.1. Systematischer Fehler

Wenn δ konstant ist über alle Iterationen, lässt sich T^j schreiben als

$$T^j = M \begin{pmatrix} e^{ij\psi_1} & 0 \\ 0 & e^{-ij\psi_2} \end{pmatrix} M^{-1} \quad (3.32)$$

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad M^{-1} = \frac{1}{m_1 - m_2} \begin{pmatrix} 1 & -m_2 \\ -1 & m_1 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

3.5. Fehlermodell 2 („Ungenauere Phaseninversion“)

mit

$$\begin{aligned}
 \psi_1 &= \arccos(q - p) \\
 \psi_2 &= \arccos(q + p) \\
 q &= \frac{1}{2} \sqrt{(1 + \cos \delta)(2 - z^2)} \\
 p &= \frac{1}{\sqrt{2}} z \sin \frac{\delta}{2} \\
 z &= \sqrt{2 - (1 + \cos \delta)x^2} \\
 x &= 1 - \frac{2}{n} \\
 m_{1/2} &= \frac{e^{-i\delta}}{2\sqrt{1-x^2}} m'_{1/2} \\
 m'_{1/2} &= x(1 - e^{i\delta}) \mp i\sqrt{2e^{i\delta}} z
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Unter Benutzung von

$$\arccos(q - p) + \arccos(q + p) = \arccos(1 - z^2) \tag{3.35}$$

$$\sqrt{e^{i\delta} - \frac{1}{4}(1 + e^{i\delta})^2 x^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\delta}{2}} z \quad \text{für } -\pi < \delta \leq \pi \tag{3.36}$$

folgt bis auf eine globale Phase

$$B_j = \frac{\sqrt{1-x}}{4z} \left\{ 2(1+x)(e^{ij \arccos(1-z^2)} - 1) - (m'_1 e^{ij \arccos(1-z^2)} - m'_2) \right\} \tag{3.37}$$

Für $n \rightarrow \infty, \delta \rightarrow 0$ gehen $m'_1, m'_2 \rightarrow 0$. Gleichung (3.37) kann also vereinfacht werden zu

$$B_j \approx \frac{\sqrt{1-x}}{2z} (1+x)(e^{ij \arccos(1-z^2)} - 1) \tag{3.38}$$

Damit erhält man die Erfolgswahrscheinlichkeit

$$P \approx \frac{1-x}{2z^2} (1+x)^2 \left(1 - \cos(j \arccos(1-z^2)) \right) \tag{3.39}$$

Mit den Näherungen

$$\begin{aligned}
 \arccos(1 - z^2) &\approx \sqrt{2} z \\
 1 + x &\approx 2 \\
 z^2 &\approx \frac{16 + n\delta^2}{2n}
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

erhält man für $j = k\sqrt{n}$

$$P \approx \frac{\sin^2 \left(2k\sqrt{1 + \frac{n\delta^2}{16}} \right)}{1 + \frac{n\delta^2}{16}} \tag{3.41}$$

3. Externe Kontrollfehler: Einfluss auf den Grover-Algorithmus

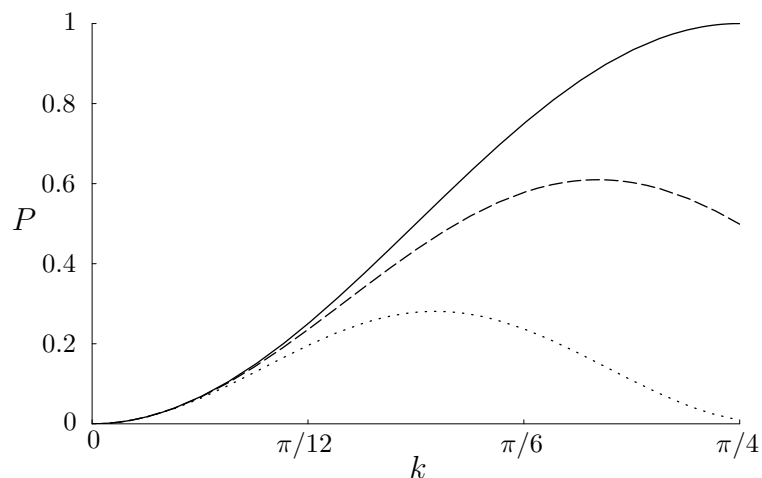


Abb. 3.2.: $P(k)$ für Grover-Algorithmus mit systematischem Fehler (Fehlermodell 2), $N = 10$ Qubits. Die Kurven entsprechen $\delta = 0$ (—), 0.1 (---) und 0.2 (⋯)

Für große n ist P also eine Funktion von $n\delta^2$, d. h. δ_{crit} skaliert wie $n^{-1/2}$. Die ideale Schrittzahl verschiebt sich auch hier leicht zu geringeren Werten (siehe dazu Abbildung 3.2). Die maximal erreichbare Erfolgswahrscheinlichkeit beträgt $P_{max} \approx (1 + \frac{n\delta^2}{16})^{-1}$ und nimmt folglich ebenfalls mit zunehmendem δ ab (siehe Abb. 3.3). Wenn man also eine maximale Erfolgswahrscheinlichkeit von $P = \frac{1}{2}$ garantieren will, muss gelten $n\delta^2 \leq 16$. Wenn man davon ausgeht, dass in einem speziellen System die Operationen mit einer bestimmten Genauigkeit ausgeführt werden können, so stellt diese Beziehung eine Bedingung für die maximale Systemgröße dar, die verwendet werden kann. Das bedeutet, dass dann n kleiner sein muss als $16/\delta^2$. Long et al. [28] sind für dieses Fehlermodell zu einem ähnliche Ergebnis gelangt, allerdings mit einem Unterschied von Faktor 2.

Für kleine $n\delta^2$ gilt $P_{max} \approx 1 - \frac{n\delta^2}{16}$ (die gleiche Näherung gilt auch, wenn trotz des Fehlers nach j_{id} Schritten gemessen wird) und damit

$$\delta_{crit} \approx 4\sqrt{\frac{\Delta}{n}} \quad (3.42)$$

3.5.2. Zufälliger Fehler

Dieser Fall wurde nur numerisch untersucht. Bei jeder Iteration wird zufällig ein δ aus einer Normalverteilung mit Standardabweichung σ gewählt. Man erhält dann für P in Abhängigkeit von j und σ das in Abbildung 3.4 gezeigte Verhalten. P ist das Mittel aus 1000 Realisierungen.

Das gefundene Verhalten ähnelt einer gedämpften Schwingung. Für wachsende σ nimmt das erreichte P_{max} ab und tritt auch erst später ein. Für große Fehler geht

3.5. Fehlermodell 2 („Ungenauere Phaseninversion“)

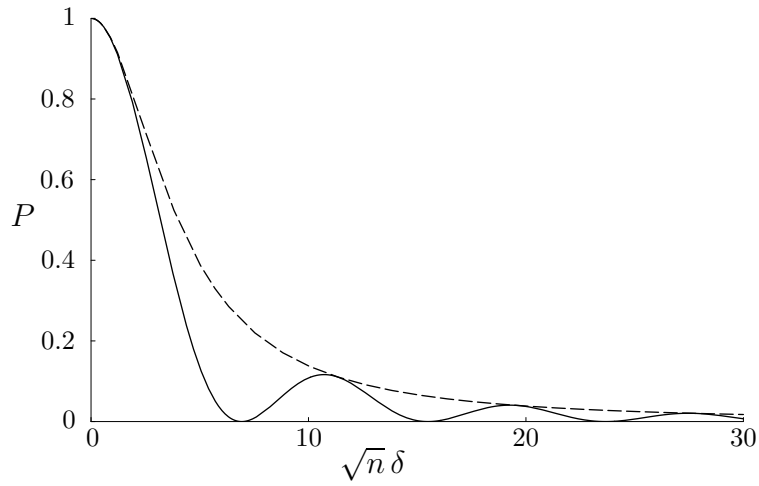


Abb. 3.3.: $P(j_{id})$ (—) und P_{max} (---) für Grover-Algorithmus mit systematischem Fehler (Fehlermodell 2)

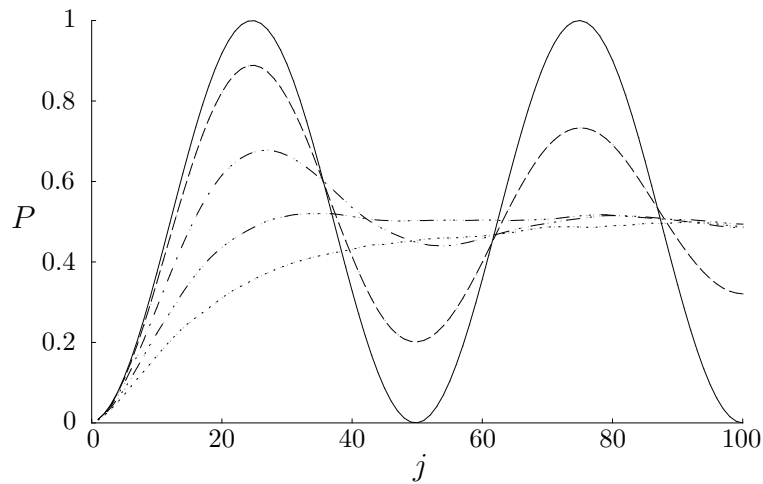


Abb. 3.4.: $P(j)$ für Grover-Algorithmus mit Zufalls-Drehungen (Fehlermodell 2), $N = 10$ Qubits, Mittelung über 1000 Realisierungen. Die Kurven entsprechen $\sigma = 0$ (—), 0.2 (---), 0.4 (-·-), 0.6 (-··-), 0.8 (····)

3. Externe Kontrollfehler: Einfluss auf den Grover-Algorithmus

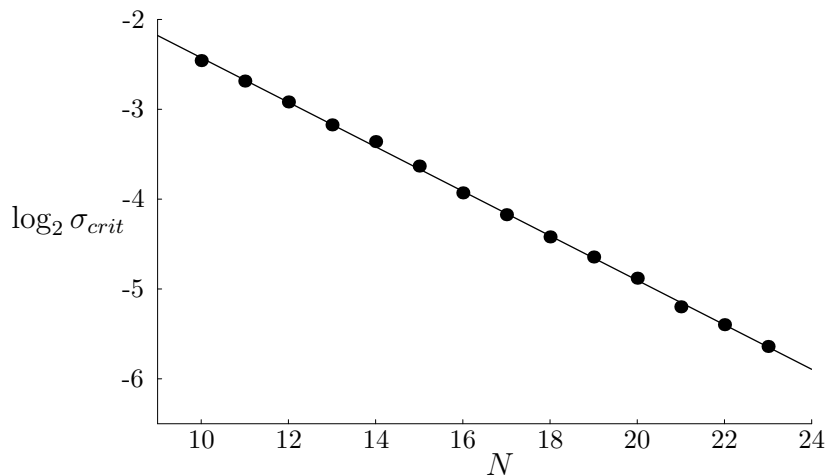


Abb. 3.5.: σ_{crit} in Abhängigkeit von N für Grover-Algorithmus mit Zufalls-Drehungen (Fehlermodell 2). P_{cut} beträgt 0.9, Mittelung über 200 Realisierungen. Die Ausgleichsgerade ist $\log_2 \sigma_{crit} = 0.0503 - 0.248N$

die Erfolgswahrscheinlichkeit wie im Fall des ersten Fehlermodells wieder gegen $P = 1/2$. Das Wachstum von P verläuft dabei aber immer langsamer, so dass die Wahrscheinlichkeit nach j_{id} Schritten gegen 0 geht.

Um das Verhalten von σ_{crit} zu bestimmen, wurde für verschiedene N zwischen 10 und 23 die Erfolgswahrscheinlichkeit P nach j_{id} Schritten in Abhängigkeit von σ berechnet. $P(\sigma)$ wurde gebildet als Mittel über 200 Realisierungen. Der kritische Fehler σ_{crit} wurde dann als der Wert von σ bestimmt, bei dem $P = P_{cut}$ gilt, wobei $P_{cut} = 0.9$ gewählt wurde.

Wie man in Abbildung 3.5 sieht, kann man die erhaltenen Werte für $\log \sigma_{crit}$ sehr gut durch eine Gerade nähern. Die Gerade hat die Gleichung

$$\log_2 \sigma_{crit} \approx 0.0503 - 0.248N \quad (3.43)$$

Man erhält also mit $n = 2^N$

$$\sigma_{crit} \approx 2^{0.0503} n^{-0.248} \quad (3.44)$$

Dieses Ergebnis stimmt sehr gut mit der Annahme überein, dass σ_{crit} das gleiche Skalierungsverhalten aufzeigt wie bei Fehlermodell 1, also

$$\sigma_{crit} \sim n^{-1/4} \quad (3.45)$$

3.6. Zusammenfassung

Für den Grover-Algorithmus mit fehlerbehafteten Operatoren erhält man bei den betrachteten Fehlermodellen zusammenfassend folgendes Skalierungsverhalten der kritischen Fehler ($n =$ Dimension des Zustandsraumes, $\Delta = 1 - P_{cut}$):

	systematischer Fehler δ_{crit}	zufälliger Fehler σ_{crit}
Fehlermodell 1	$\frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{\Delta}{n}}$	$2 \sqrt{\frac{\Delta}{\pi}} n^{-1/4}$
Fehlermodell 2	$4 \sqrt{\frac{\Delta}{n}}$	$\sim n^{-1/4}$

Dabei ist bemerkenswert, dass die unterschiedlichen Fehlermodelle, die auch ein deutlich verschiedenes Verhalten des Algorithmus nach sich ziehen, zu den gleichen Ergebnissen führen, was das Skalierungsverhalten von σ_{crit} und δ_{crit} betrifft. Insbesondere wird das nur numerisch erhaltene Ergebnis für Fehlermodell 2 mit zufälligen Fehlern durch das Ergebnis für das erste Fehlermodell bestätigt.

Ähnliche Abhängigkeiten wurden auch in numerischen Simulationen von Ionenfallen-Quantencomputern nachgewiesen, allerdings mit anderen Exponenten [29, 30]. Dieser Unterschied liegt vermutlich in den anders gewählten Fehlermodellen. Vor kurzem wurde ein Fehlermodell vorgeschlagen, das auch die „Diffusion“ der Wahrscheinlichkeit aus dem zweidimensionalen Raum heraus beschreibt [31]. Bei diesem Modell handelt es sich im Wesentlichen um eine Modifikation von Fehlermodell 1.

Insgesamt kann man feststellen, dass die Einführung von Fehlern in den Grover-Algorithmus zu einer Reduzierung der Performance führt. Wenn diese Verluste klein gehalten werden sollen, dürfen die Fehler bestimmte kritische Werte nicht überschreiten. Die tolerierbaren Fehler hängen empfindlich von der Größe des Datensatzes bzw. der Anzahl Qubits ab. Wegen $n = 2^N$ ($N = \text{Bit-Zahl}$) nehmen die Fehlertoleranzen exponentiell mit der Anzahl der Qubits ab, sowohl für systematische als auch für zufällige Fehler. Dabei sind systematische Fehler schwerer zu verkraften. Für große Systeme sind diese Schranken nur noch schwer einzuhalten, aber gerade dann wird der Algorithmus erst bedeutend für sinnvolle Anwendungen.

4. Interne System-Fehler: Einfluss unerwünschter Kopplungen zwischen Qubits

4.1. Einleitung

Beim Quantencomputer befinden sich die Daten während des Rechenvorgangs in einem Register, das in der Regel durch eine lineare Anordnung einer bestimmten Anzahl von Qubits realisiert werden soll. Im Idealfall nimmt man an, dass Register-Qubits, auf die keine Operation ausgeführt wird, keine Änderung erfahren. Tatsächlich tritt aber in jedem physikalischen System Dekohärenz auf, und selbst bei perfekter Abschirmung nach außen gibt es noch interne Wechselwirkungen zwischen den Qubits. Diese Qubit-Qubit-Kopplungen sind einerseits notwendig, um Zwei-Qubit-Operationen ausführen zu können, und andererseits unerwünscht zwischen Qubits, die nicht an einem aktuellen Rechenschritt teilnehmen und in einem bestimmten Zustand verbleiben sollen.

Im Folgenden wird als Modell für ein Register eine Spinkette angenommen. Zwischen benachbarten Spins soll eine Wechselwirkung existieren. Ein während einer Rechnung auftretender Zustand ist in der Regel kein Eigenzustand und damit nicht stationär. Ein allgemeiner Zustand, der gespeichert werden soll, wird daher in der Regel mit der Zeit in andere Zustände übergehen. Im Besonderen sollen lokalisierte Anregungen und deren Delokalisierungsverhalten betrachtet werden.

4.2. Zeitentwicklung eines n -Niveau-Systems

Zuerst soll allgemein die Zeitentwicklung in einem n -Niveau-System betrachtet werden. Eine Basis des Mehrteilchensystems sei $\{|i\rangle\}$, z. B. die Produktbasis. Der (zeitunabhängige) Hamiltonoperator des Systems sei \mathcal{H} , mit Eigendarstellung

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^n E_k |E_k\rangle \langle E_k| \quad (4.1)$$

4.2. Zeitentwicklung eines n -Niveau-Systems

Ein Zustand der Produktbasis lässt sich darstellen als

$$|i\rangle = \sum_{k=1}^n |E_k\rangle \langle E_k|i\rangle \quad (4.2)$$

Die Zeitentwicklung wird bestimmt durch die unitäre Operation

$$\begin{aligned} \hat{U} &= e^{-i\mathcal{H}t} \\ &= \sum_{k=1}^n e^{-iE_k t} |E_k\rangle \langle E_k| \end{aligned} \quad (4.3)$$

Also gilt für den Zustand nach Ablauf der Zeit t

$$\begin{aligned} |i'\rangle &= \hat{U} |i\rangle \\ &= \sum_{k=1}^n e^{-iE_k t} |E_k\rangle \langle E_k|i\rangle \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\langle i|i'\rangle = \sum_{k=1}^n e^{-iE_k t} |\langle i|E_k\rangle|^2 \quad (4.5)$$

Die Wahrscheinlichkeit, nach der Zeit t den Ausgangszustand wieder vorzufinden, ist gegeben durch die Fidelity F .

Definition 4.1 (Fidelity) *Ein Spin-System unterliege einem Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$. Die Fidelity*

$$F = \left| \langle i | \hat{U}(t) | i \rangle \right|^2 \quad (4.6)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, nach der Zeitentwicklung $\hat{U}(t)$ bei einer Messung den Anfangszustand wieder vorzufinden.

Für das hier betrachtete System erhält man dann

$$\begin{aligned} F &= |\langle i|i'\rangle|^2 \\ &= \sum_{k,k'=1}^n e^{-i(E_k - E_{k'})t} |\langle i|E_k\rangle|^2 |\langle i|E_{k'}\rangle|^2 \\ &= \sum_{k,k'=1}^n \cos(E_{kk'}t) |\langle i|E_k\rangle|^2 |\langle i|E_{k'}\rangle|^2 \end{aligned} \quad (4.7)$$

mit

$$E_{kk'} = E_k - E_{k'} \quad (4.8)$$

Die Fidelity ist also bestimmt durch das Eigenwertspektrum des System-Hamiltonoperators und den Anfangszustand.

4. Interne System-Fehler: Einfluss unerwünschter Kopplungen zwischen Qubits

Periodizität

Aus (4.7) folgt, dass F als eine Überlagerung von harmonischen Schwingungen dargestellt werden kann. Je nach auftretendem Eigenwertspektrum E_k kann sich das System streng periodisch verhalten, das bedeutet es gibt eine endliche Wiederkehrzeit, oder nur „quasiperiodisch“. In diesem Fall ist die Wiederkehrzeit unendlich groß, und es entsteht keine periodische Dynamik. Die Dynamik für einen bestimmten Anfangszustand $|i\rangle$ ist streng periodisch, wenn alle beitragenden (d. h. $\langle i|E_k\rangle \neq 0 \wedge \langle i|E_{k'}\rangle \neq 0$) Energiedifferenzen $E_{kk'}$ in einem rationalen Verhältnis zueinander stehen. Das heißt für alle Verhältnisse zweier Energiedifferenzen muss gelten

$$E_{kk'}/E_{k''k'''} \in \mathbb{Q} \quad (4.9)$$

Wenn auch nur ein Paar von Energiedifferenzen in irrationalem Verhältnis zueinander steht, dann verhält sich das System quasiperiodisch.

4.3. Hamiltonoperator der Spinkette

Im Folgenden soll speziell eine endliche homonukleare Spinkette mit einer Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn betrachtet werden. Der Hamiltonoperator soll die folgende Form haben

$$\mathcal{H} = -\nu \sum_{k=1}^N \hat{\sigma}_z^{(k)} + J \sum_{k=1}^{N-1} \left\{ c \left(\hat{\sigma}_x^{(k)} \hat{\sigma}_x^{(k+1)} + \hat{\sigma}_y^{(k)} \hat{\sigma}_y^{(k+1)} \right) + \hat{\sigma}_z^{(k)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)} \right\} \quad (4.10)$$

Er besteht aus dem Zeeman-Term, der durch ein äußeres Magnetfeld verursacht wird, und dem Wechselwirkungsterm, hier je nach der Wahl von c eine schwache ($c = 0$) oder starke ($c = 1$) J -Kopplung [32, 33]. Er kann umgeschrieben werden, wenn man Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren einführt

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_\pm &= \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_x \pm i \hat{\sigma}_y) \\ \hat{\sigma}_x &= \hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_- \\ \hat{\sigma}_y &= -i (\hat{\sigma}_+ - \hat{\sigma}_-) \end{aligned} \quad (4.11)$$

Damit wird

$$\mathcal{H} = -\nu \sum_{k=1}^N \hat{\sigma}_z^{(k)} + J \sum_{k=1}^{N-1} \left\{ 2c \left(\hat{\sigma}_+^{(k)} \hat{\sigma}_-^{(k+1)} + \hat{\sigma}_-^{(k)} \hat{\sigma}_+^{(k+1)} \right) + \hat{\sigma}_z^{(k)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)} \right\} \quad (4.12)$$

Für $\hat{\sigma}_+$ und $\hat{\sigma}_-$ gelten folgende Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned} [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_+] &= 2 \hat{\sigma}_+ & [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_-] &= -2 \hat{\sigma}_- \\ \left[\hat{\sigma}_z^{(j)}, \hat{\sigma}_+^{(j)} \hat{\sigma}_-^{(k)} \right] &= 2 \hat{\sigma}_+^{(j)} \hat{\sigma}_-^{(k)} & \left[\hat{\sigma}_z^{(k)}, \hat{\sigma}_+^{(j)} \hat{\sigma}_-^{(k)} \right] &= -2 \hat{\sigma}_+^{(j)} \hat{\sigma}_-^{(k)} \\ \left[\hat{\sigma}_z^{(j)}, \hat{\sigma}_-^{(j)} \hat{\sigma}_+^{(k)} \right] &= -2 \hat{\sigma}_-^{(j)} \hat{\sigma}_+^{(k)} & \left[\hat{\sigma}_z^{(k)}, \hat{\sigma}_-^{(j)} \hat{\sigma}_+^{(k)} \right] &= 2 \hat{\sigma}_-^{(j)} \hat{\sigma}_+^{(k)} \end{aligned} \quad (4.13)$$

4.3. Hamiltonoperator der Spinkette

Daraus folgt

$$\left[\sum_{k=1}^N \hat{\sigma}_z^{(k)}, \mathcal{H} \right] = 0 \quad (4.14)$$

Der Erwartungswert von $\hat{S}_z = \sum_{k=1}^N \hat{\sigma}_z^{(k)}$ ist also eine Erhaltungsgröße. Für die Berechnung der Matrixelemente des Hamiltonoperators sind folgende Beziehungen für die Wirkung der Spinoperatoren auf die Basiszustände $|j\rangle$ ($j = 0, 1$) nützlich:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_+ |j\rangle &= (1-j) |1-j\rangle \\ \hat{\sigma}_- |j\rangle &= j |1-j\rangle \\ \hat{\sigma}_z |j\rangle &= (2j-1) |j\rangle \end{aligned} \quad (4.15)$$

Basiszustände für das N -Teilchen System sind die Produktzustände

$$\begin{aligned} |\mathbf{i}\rangle &= |i_1 i_2 \dots i_N\rangle = |i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_N\rangle \\ &= \prod_{s=1}^N |i_s\rangle^{(s)} \end{aligned} \quad (4.16)$$

mit $i_s = 0, 1$ (\mathbf{i} ist also ein N -bit-String). Für \hat{S}_z erhält man dann den Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_z \rangle &= \sum_{k=1}^N (2i_k - 1) \\ &= 2F_z - N \end{aligned} \quad (4.17)$$

mit

$$F_z = \sum_{k=1}^N i_k \quad (4.18)$$

Aus der Erhaltung von $\langle \hat{S}_z \rangle$ folgt also, dass auch F_z eine Erhaltungsgröße sein muss. Es finden also keine Übergänge zwischen Zuständen mit verschiedenem F_z statt.

Man erhält dann für die Matrixelemente $\langle \mathbf{i} | \mathcal{H} | \mathbf{j} \rangle$ Folgendes:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{i} | \mathcal{H} | \mathbf{j} \rangle &= -\nu A + JB + 2c JC \\ A &= \sum_{k=1}^N \langle \mathbf{i} | \hat{\sigma}_z^{(k)} | \mathbf{j} \rangle \\ B &= \sum_{k=1}^{N-1} \langle \mathbf{i} | \hat{\sigma}_z^{(k)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)} | \mathbf{j} \rangle \\ C &= \sum_{k=1}^{N-1} \langle \mathbf{i} | \hat{\sigma}_+^{(k)} \hat{\sigma}_-^{(k+1)} + \hat{\sigma}_-^{(k)} \hat{\sigma}_+^{(k+1)} | \mathbf{j} \rangle \end{aligned} \quad (4.19)$$

4. Interne System-Fehler: Einfluss unerwünschter Kopplungen zwischen Qubits

Für A , B und C erhält man mit (4.15)

$$\begin{aligned}
A &= \sum_{k=1}^N \left(\langle i_k | \hat{\sigma}_z^{(k)} | j_k \rangle \prod_{s \neq k} \langle i_s | j_s \rangle \right) \\
&= \sum_{k=1}^N \left((2j_k - 1) \prod_s \langle i_s | j_s \rangle \right) \\
&= (2F_z - N) \langle \mathbf{i} | \mathbf{j} \rangle
\end{aligned} \tag{4.20}$$

$$\begin{aligned}
B &= \sum_{k=1}^{N-1} \left(\langle i_k i_{k+1} | \hat{\sigma}_z^{(k)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)} | j_k j_{k+1} \rangle \prod_{s \neq k, k+1} \langle i_s | j_s \rangle \right) \\
&= \sum_{k=1}^{N-1} \left((2j_k - 1)(2j_{k+1} - 1) \prod_s \langle i_s | j_s \rangle \right) \\
&= (N - 2r - 1) \langle \mathbf{i} | \mathbf{j} \rangle
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Dabei ist r die Anzahl von 01- und 10-Paaren in \mathbf{j} . Das folgt daraus, dass benachbarte Spins mit verschiedenem j einen Beitrag -1 , Paare mit gleichem j einen Beitrag 1 liefern.

$$\begin{aligned}
C &= \sum_{k=1}^{N-1} \left(\langle i_k i_{k+1} | \hat{\sigma}_+^{(k)} \hat{\sigma}_-^{(k+1)} + \hat{\sigma}_-^{(k)} \hat{\sigma}_+^{(k+1)} | j_k j_{k+1} \rangle \prod_{s \neq k, k+1} \langle i_s | j_s \rangle \right) \\
&= \begin{cases} 1 & \text{wenn } |\mathbf{i}\rangle \text{ und } |\mathbf{j}\rangle \text{ durch Vertauschen von genau ei-} \\ & \text{nem 10- oder 01-Paar auseinander hervorgehen} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Also

$$\langle \mathbf{i} | \mathcal{H} | \mathbf{j} \rangle = (\nu(N - 2F_z) + J(N - 2r - 1)) \langle \mathbf{i} | \mathbf{j} \rangle + 2c JC_{ij} \tag{4.23}$$

Wie auch bereits aus der Kommutatorrelation (4.14) folgt, finden also keine Übergänge zwischen Zuständen mit verschiedenem F_z statt. Für die Zeitentwicklung kann man also verschiedene $F_z = \text{konst}$ -Unterräume getrennt betrachten. Insbesondere bilden die Zustände $|000\dots\rangle$ und $|111\dots\rangle$ jeweils einen Unterraum für sich und sind Eigenzustände.

Speziell für schwache J -Kopplung ($c = 0$) gilt ferner, dass \mathcal{H} in der Produktbasis diagonal ist. Die Zeitentwicklung führt in diesem Fall also nicht zu Übergängen zwischen verschiedenen Produktbasis-Zuständen, sondern nur zur Änderung der relativen Phase. Allerdings ist auch das ein Problem für einen Quantencomputer, da dadurch z. B. verschiedene Zustände der Bell-Basis ineinander überführt werden können.

4.4. Zeitentwicklung im $F_z=1$ -Unterraum

Die weiteren Rechnungen sollen auf eine Spinkette mit einer starken J -Kopplung ($c = 1$) und Zustände mit $F_z = 1$ („Ein-Spin-Anregungen“) beschränkt bleiben. Sie bilden die Basis eines N -dimensionalen Hilbertraumes, in dem die Zeitentwicklung getrennt betrachtet werden kann. Die Basis $\{|j\rangle\}$ dieses Unterraumes ist gegeben durch

$$|j\rangle = \prod_{k=1}^N |\delta_{kj}\rangle^{(k)} \quad j = 1, \dots, N \quad (4.24)$$

also durch die Zustände $|1\rangle = |100\dots 0\rangle$, $|2\rangle = |010\dots 0\rangle$ usw. Man erhält damit für die Matrixelemente von \mathcal{H}

$$\langle j | \mathcal{H} | j' \rangle = \nu(N-2)\delta_{jj'} + J(N-2r-1)\delta_{jj'} + 2J(\delta_{j',j+1} + \delta_{j',j-1}) \quad (4.25)$$

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \alpha &= \nu(N-2) + J(N-5) \\ \beta &= 2J \end{aligned} \quad (4.26)$$

folgt dann

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{jj} &= \nu(N-2) + J(N-2r-1) \\ &= \begin{cases} \alpha + \beta & \text{für } j = 1, N \\ \alpha & \text{für } j = 2, \dots, N-1 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\mathcal{H}_{j,j+1} = \beta \quad (4.28)$$

$$\mathcal{H}_{j,j-1} = \beta \quad (4.29)$$

In der Matrixdarstellung kann der Hamiltonoperator also geschrieben werden als Summe zweier Matrizen

$$(\mathcal{H}_{jj'}) = \alpha \mathbf{1} + \beta \mathbf{K} \quad (4.30)$$

mit

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & & & & & & & \\ 1 & 0 & 1 & & & & & & \\ & 1 & 0 & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & \\ & & & & 0 & 1 & & & \\ & & & & 1 & 0 & 1 & & \\ & & & & & 1 & 1 & & \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

Die Elemente außerhalb der Haupt- und Nebendiagonalen sind dabei alle gleich Null. Die Eigenwerte λ_k von \mathbf{K} und die normierten Eigenvektoren \mathbf{v}_k werden in

4. Interne System-Fehler: Einfluss unerwünschter Kopplungen zwischen Qubits

Anhang B berechnet. Das Ergebnis ist

$$\lambda_k = 2 \cos \frac{k\pi}{N} \quad \text{für } k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (4.32)$$

$$\mathbf{v}_k = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N}} (1, 1, \dots, 1) & \text{für } k = 0 \\ \sqrt{\frac{2}{N}} \left(\cos \frac{k\pi}{2N}, \cos 3\frac{k\pi}{2N}, \dots, \cos(2N-1)\frac{k\pi}{2N} \right) & \text{für } k = 1, \dots, N-1 \end{cases} \quad (4.33)$$

Die Eigenwerte von \mathcal{H} sind dann $E_k = \alpha + \beta\lambda_k$, und es folgt

$$E_k = \alpha + 2\beta \cos \frac{k\pi}{N} \quad (4.34)$$

$$E_{kk'} = 2\beta \left(\cos \frac{k\pi}{N} - \cos \frac{k'\pi}{N} \right) \quad (4.35)$$

$$\langle i | E_k \rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N}} & \text{für } k = 0 \\ \sqrt{\frac{2}{N}} \cos(2i-1)\frac{k\pi}{2N} & \text{für } k = 1, \dots, N-1 \end{cases} \quad (4.36)$$

Als Beispiel soll die Fidelity des Zustands $|1\rangle$ (vgl. Definition nach (4.24)) betrachtet werden. Dieser Zustand stellt eine am Rand der Spinkette lokalisierte Anregung dar. Für den Zustand $|1\rangle$ erhält man mit (4.7)

$$N = 2 \quad F = \cos^2(2Jt) \quad (4.37)$$

$$N = 3 \quad F = \frac{1}{18} (7 + 6 \cos(2Jt) + 3 \cos(4Jt) + 2 \cos(6Jt)) \quad (4.38)$$

In den Abbildungen 4.1 bis 4.6 ist F für diesen Zustand für verschiedene N gezeigt. Dazu folgende Bemerkungen:

- F ist Funktion von Jt (folgt aus der Formel für $E_{kk'}$), so dass sich bei stärkerer Kopplung nur die Zeitskala ändert.
- Für $N = 2$ und $N = 3$ ist F periodisch, für alle anderen N quasiperiodisch (der Beweis dazu folgt im nächsten Abschnitt).
- Für größere N fällt F schnell auf einen kleinen Wert ab und sinkt dann langsamer relativ monoton. Dabei ist das Verhalten für kleine Jt praktisch unabhängig von N .
- Bei $Jt \approx N/2$ tritt ein „Echo“ auf. Dieses Echo wird für zunehmendes N immer schwächer.

4.4. Zeitentwicklung im $F_z=1$ -Unterraum

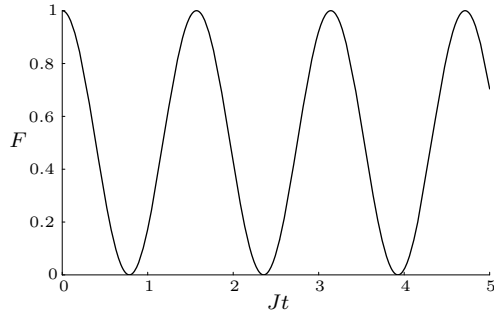


Abb. 4.1.: F für $|1\rangle$, $N = 2$

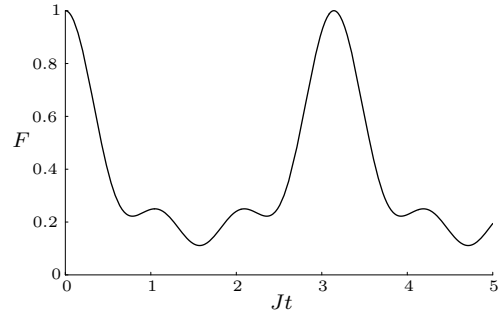


Abb. 4.2.: F für $|1\rangle$, $N = 3$

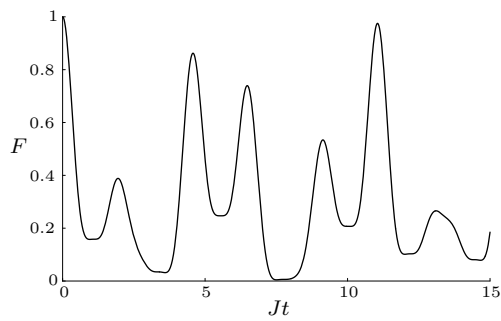


Abb. 4.3.: F für $|1\rangle$, $N = 4$

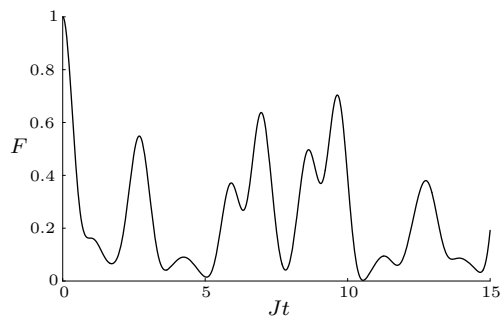


Abb. 4.4.: F für $|1\rangle$, $N = 5$

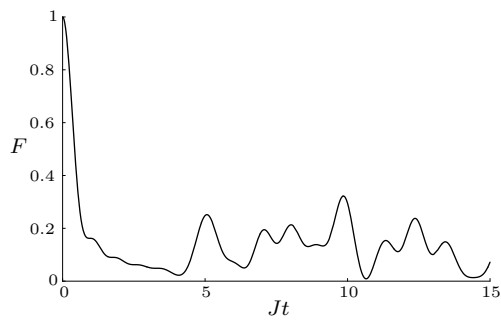


Abb. 4.5.: F für $|1\rangle$, $N = 10$

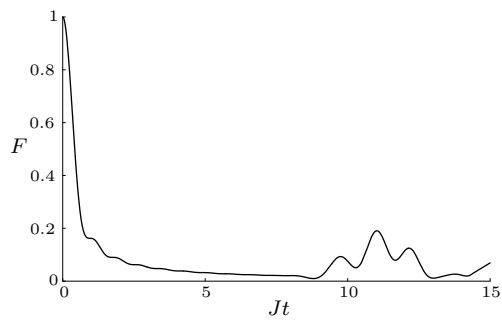


Abb. 4.6.: F für $|1\rangle$, $N = 20$

4. Interne System-Fehler: Einfluss unerwünschter Kopplungen zwischen Qubits

4.4.1. Periodizität

Wie bereits gesagt, ist F periodisch, wenn alle beteiligten Energiedifferenzen $E_{kk'}$ ein rationales Verhältnis zueinander haben. Für den Zustand $|1\rangle$ ist bei $N = 2, 3$ diese Bedingung erfüllt. Hier soll bewiesen werden, dass für alle anderen N quasiperiodisches Verhalten vorliegt.

Für $N = 2$ gibt es nur eine einzige Energiedifferenz, E_{01} , daher tritt nur ein einziger Schwingungsterm auf, und es ergibt sich strenge Periodizität.

Für $N \geq 3$ ist eine notwendige Bedingung dafür, dass alle $E_{kk'}$ ein rationales Verhältnis zueinander haben, dass E_{01} und E_{02} ein rationales Verhältnis haben, also

$$1 - \cos \frac{2\pi}{N} = \frac{p'}{q'} (1 - \cos \frac{\pi}{N}) \quad \text{für } p', q', N \in \mathbb{N} \quad (4.39)$$

Daraus folgt, dass $\cos \frac{\pi}{N} = 1$ (nicht erfüllbar) oder $\cos \frac{\pi}{N} = \frac{p'-2q'}{2q'}$, es muss also gelten

$$\cos \frac{\pi}{N} = \frac{p}{q} \quad \text{für } p, q, N \in \mathbb{N} \quad (4.40)$$

Strenge Periodizität kann also höchstens dann auftreten, wenn $\cos \frac{\pi}{N}$ eine rationale Zahl ist. Diese Bedingung lässt sich nur für $N = 1, 2$ oder 3 erfüllen [34]. Also gibt es keine Systeme mit $N > 3$, für die F streng periodisch ist.

4.4.2. Verhalten für große N

In den folgenden Abschnitten soll das Verhalten für große Systeme untersucht werden. Für große N kann man die Summe in (4.7) durch ein Integral nähern. Der Fehler, den man dabei an den Integrationsgrenzen macht, ist vernachlässigbar, also

$$\begin{aligned} F &= \iint_0^N dk dk' \cos(E_{kk'}t) |\langle i|E_k\rangle|^2 |\langle i|E_{k'}\rangle|^2 \\ &= \frac{4}{N^2} \iint_0^N dk dk' \cos(E_{kk'}t) \cos^2 \frac{(2i-1)\pi k}{2N} \cos^2 \frac{(2i-1)\pi k'}{2N} \end{aligned} \quad (4.41)$$

4.4.3. Verhalten für kleine t

Für kleine t kann $\cos(E_{kk'}t)$ durch $1 - \frac{t^2}{2}E_{kk'}^2$ genähert werden. Mit (4.41) erhält man dann

$$\begin{aligned}
 F &= \left(\frac{2}{N} \int_0^N dk \cos^2 \frac{(2i-1)\pi k}{2N} \right)^2 \\
 &\quad - 8J^2 t^2 \left(\frac{4}{N} \int_0^N dk \cos^2 \frac{(2i-1)\pi k}{2N} \cos^2 \frac{\pi k}{N} \right) \left(\frac{2}{N} \int_0^N dk \cos^2 \frac{(2i-1)\pi k}{2N} \right) \\
 &\quad + 4J^2 t^2 \left(\frac{4}{N} \int_0^N dk \cos^2 \frac{(2i-1)\pi k}{2N} \cos \frac{\pi k}{N} \right)^2 \\
 &= 1 - 8J^2 t^2 + (\delta_{i1} + \delta_{iN}) 4J^2 t^2
 \end{aligned} \tag{4.42}$$

Das Verhalten für kleine t ist also vor allem durch die nächsten Nachbarn bestimmt. Die Zustände, bei denen ein Randspin angeregt wird, also $i = 1$ oder $i = N$, verhalten sich für kleine t wie ein $N=2$ -System. Die anderen Zustände, bei denen die angeregten Spins zwei nächste Nachbarn haben, delokalisieren schneller. Dabei ist die Delokalisierungszeit, d. h. die Zeit, die nötig ist, um auf ein bestimmtes F nahe 1 abzufallen, für Randzustände um Faktor $\sqrt{2}$ länger.

4.4.4. F von speziellen Anfangs-Zuständen

Hier soll noch das Verhalten der Fidelity F für zwei spezielle Zustände betrachtet werden, die Anregung eines Spins am Rand der Spinkette und eines Spins in der Mitte der Kette.

Anregung am Rand

Zunächst soll ein Zustand betrachtet werden, bei dem der Randspin angeregt wird, also die Zustände $|1\rangle = |100\dots 0\rangle$ und $|N\rangle = |0\dots 001\rangle$. Mit $i = 1$ ($i = N$) in (4.41) erhält man

$$F = \frac{4}{N^2} \iint_0^N dk dk' \cos(E_{kk'}t) \cos^2 \frac{\pi k}{2N} \cos^2 \frac{\pi k'}{2N} \tag{4.43}$$

Mit der Substitution $x = \cos \frac{k\pi}{N}$ folgt

$$\begin{aligned}
 F &= \frac{1}{\pi^2} \iint_{-1}^1 dx dx' \frac{1+x'}{\sqrt{1-x'^2}} \frac{1+x}{\sqrt{1-x^2}} \cos(2\beta t(x-x')) \\
 &= \left(\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{\cos 2\beta t x}{\sqrt{1-x^2}} \right)^2 + \left(\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{x \sin 2\beta t x}{\sqrt{1-x^2}} \right)^2
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

Diese Integrale ergeben gerade die Bessel-Funktionen J_0 und J_1 . Einige Eigenschaften dieser Funktionen sind in Anhang C aufgelistet. Damit folgt

$$F = J_0^2(4Jt) + J_1^2(4Jt) \quad \text{für } N \rightarrow \infty \tag{4.45}$$

4. Interne System-Fehler: Einfluss unerwünschter Kopplungen zwischen Qubits

Für ein Schaubild dieser Funktion siehe Abb. 4.7. Einige Eigenschaften von F sind

- F nimmt monoton ab mit der Zeit (C.8).
- Für kleine t gilt mit (C.9) die Näherung

$$F \approx 1 - 4(Jt)^2 \quad (4.46)$$

Dieses Verhalten stimmt überein mit dem Resultat (4.42).

- Für große t gilt wegen (C.10) die Näherung

$$F \rightarrow (2\pi Jt)^{-1} \quad (4.47)$$

Aus den Abbildungen von F für kleine N sieht man ferner, dass F für diesen Fall im Bereich kleiner t sehr schnell gegen (4.45) geht. Größere Abweichungen gibt es erst zu späteren Zeiten, wo das Echo auftritt.

Anregung in der Mitte

Als zweiter spezieller Zustand wird die Anregung eines Spins in der Mitte der Spinkette betrachtet. Dabei wird angenommen, dass die Kette aus einer ungeraden Anzahl Spins besteht. Für den Zustand $|\frac{N+1}{2}\rangle = |\dots 00100 \dots\rangle$ erhält man dann

$$\begin{aligned} F &= \frac{4}{N^2} \sum_{k,k'=1}^N \cos(E_{kk'}t) \cos^2 \frac{\pi k}{2} \cos^2 \frac{\pi k'}{2} \\ &= \frac{4}{N^2} \sum_{k,k'=1}^{N/2} \cos(E_{2k,2k'}t) \\ &= \frac{4}{N^2} \iint_{\emptyset}^{N/2} dk dk' \cos(E_{2k,2k'}t) \end{aligned} \quad (4.48)$$

Mit der Substitution $x = \cos \frac{2k\pi}{N}$ folgt

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{\pi^2} \iint_{-1}^1 dx dx' \frac{1}{\sqrt{1-x'^2}} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \cos(2\beta t(x-x')) \\ &= \left(\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{\cos 2\beta t x}{\sqrt{1-x^2}} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.49)$$

also

$$F = J_0^2(4Jt) \quad \text{für } N \rightarrow \infty \quad (4.50)$$

Für ein Schaubild dieser Funktion siehe Abb. 4.7. Einige Eigenschaften von F sind

4.4. Zeitentwicklung im $F_z=1$ -Unterraum

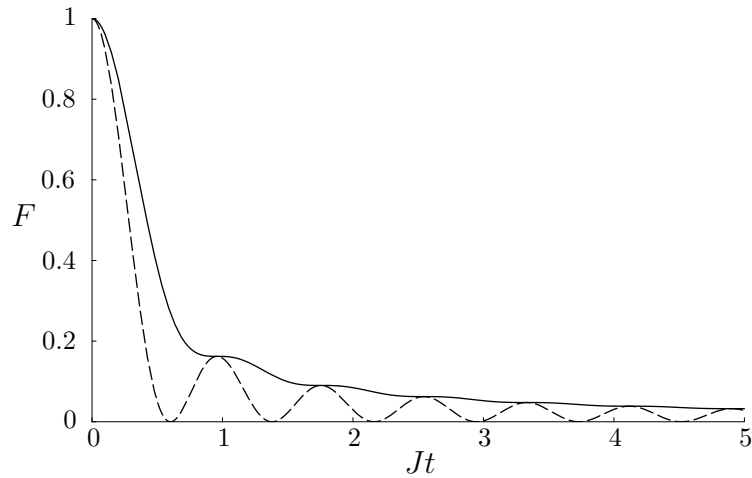


Abb. 4.7.: F für $|1\rangle$ (—) und $|\frac{N+1}{2}\rangle$ (---)

- Für kleine t gilt mit (C.9) die Näherung

$$F \approx 1 - 8(Jt)^2 \quad (4.51)$$

Das stimmt ebenfalls mit (4.42) überein.

- F ist für alle t kleiner als bei Anregung am Rand.

Das Verhalten dieses Zustands entspricht dabei für große N gerade dem Verhalten eines $F_z=1$ -Zustands in einer Spinkette mit periodischen Randbedingungen.

4.4.5. Delokalisierungszeit

Aus dem bisher gesagten folgt, dass die Delokalisierungszeit in Abhängigkeit von N nach oben beschränkt ist. Für die Zustände $|100\dots 0\rangle$ und $|000\dots 1\rangle$ erhält man für verschiedene N die folgenden Werte für die Delokalisierungszeit bei einer Schwellenwahrscheinlichkeit von $1/2$:

N	2	3	4	5	6	∞
Jt_{delok}	0.393	0.421867	0.420023	0.420057	0.4200562	0.4200562

Die Fidelity F geht also für kleine t mit wachsendem N sehr schnell gegen (4.45), und damit geht auch die Delokalisierungszeit schnell gegen einen konstanten Wert. Für den Zustand $|\frac{N+1}{2}\rangle$ geht die entsprechende Delokalisierungszeit gegen 0.2816. Das ist ungefähr $\sqrt{2}$ -mal so schnell wie bei einem Randzustand.

4.5. Zusammenfassung

Es wurde die Zeitentwicklung von lokalisierten Zuständen in einer linearen Kette aus N wechselwirkenden Spins untersucht. Insbesondere wurden Zustände mit $F_z = 1$ betrachtet, das entspricht lokalisierten Zuständen, bei denen genau ein Spin in der Kette angeregt ist.

Die Wechselwirkung, hier eine starke J -Kopplung, führt zu einer Delokalisierung der Zustände. Das bedeutet, dass ein Quantenregister, welches durch dieses Modell beschrieben wird, einen Zustand im Allgemeinen nur für eine begrenzte Zeit speichern kann.

Die Dynamik des Systems ist für die betrachteten Zustände nur für $N = 2, 3$ periodisch. Ein „stroboskopischer“ Speicher, der eine Periodizität in der Dynamik ausnutzt und nur auf das Register zugreift, wenn gerade eine maximale Fidelity vorliegt, lässt sich also für die praktisch interessanten großen Systeme nicht realisieren.

Für große N ist die Fidelity vielmehr eine mit der Zeit monoton abfallende Funktion. Dabei gibt es am Anfang einen schnellen Abfall. Es hat sich allerdings gezeigt, dass die Delokalisierungszeit weitgehend unabhängig von N ist. Das entspricht dem vereinfachten Modell, dass jeder Spin für kleine Zeiten nur seine nächsten Nachbarn „spürt“.

Im folgenden Kapitel soll untersucht werden, ob sich durch Kontrollmöglichkeiten von außen die Delokalisierungszeit erhöhen lässt.

5. Kompensation interner System-Fehler: Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

5.1. Einleitung

It is awfully hard work doing nothing.
Oscar Wilde

Um einen Quantencomputer realisieren zu können, benötigt man ein System, das die Implementation von fundamentalen Ein- und Zwei-Qubit-Operationen gewährleistet. Aus diesen Basisoperationen können dann alle möglichen Operationen aufgebaut werden. Dazu werden für die Zwei-Qubit-Operationen interne Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Qubits benötigt. Gleichzeitig stören diese Wechselwirkungen, da sie in der Regel nicht beliebig an- und abgestellt werden können und ein Teil dieser Wechselwirkungen deshalb auch immer unerwünscht ist. Eine wichtige Aufgabe ist es daher, Methoden zu finden, mit denen gezielt eine gewünschte Kopplung zwischen bestimmten Qubits erzeugt werden kann. Insbesondere für Implementationen, die NMR-Techniken verwenden, ist das wichtig, da hier eine feststehende Kopplung zwischen den einzelnen Spins vorliegt, die von außen nicht beeinflusst werden kann. Im Folgenden soll deswegen besonders auf NMR-Quantencomputer eingegangen werden.

Die zugrundeliegende Methode, die in der konventionellen NMR entwickelt wurde, ist das Spin Echo [35]. Sie beruht darauf, dass die freie Entwicklung des betrachteten Spinsystems durch Radiopulse unterbrochen wird, um eine gewünschte Zeitentwicklung des Systems zu erzwingen. Dadurch wird es zum Beispiel möglich, die Entwicklung praktisch umzukehren, was man auch als „Refocusing“ bezeichnet. Allerdings hat man in der konventionellen NMR eine andere Zielsetzung als für Quantencomputing. Die herkömmliche NMR dient vor allem zur Strukturuntersuchung. Refocusing-Techniken werden eingesetzt, um in einem Spektrum bestimmte Linien besser auflösen zu können oder um Feldinhomogenitäten zu kompensieren. Dabei wird das System in einem bekannten Zustand präpariert, und nur die Entwicklung eines bestimmten Teilsystem wird beeinflusst. Für einen

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

Quantencomputer gelten andere Anforderungen, da die logischen Operationen auf jeden beliebigen Input-Zustand wirken müssen und das gesamte System kontrolliert werden soll. Während eine Operation auf bestimmte Spins ausgeführt wird, sollen die restlichen Spins möglichst „eingefroren“ sein [36].

Der interne Hamiltonoperator in einem NMR-System besteht aus den Ein-Qubit-Termen (Zeeman-Terme bzw. chemische Verschiebung) und den Wechselwirkungstermen zwischen Qubit-Paaren. Die grundlegende Problemstellung ist es nun, praktisch beliebige Terme des Hamiltonians „ausschalten“ zu können, so dass sich z. B. nur ein einziger Spin entsprechend seiner chemischen Verschiebung entwickelt oder effektiv nur noch eine Kopplung zwischen einem einzigen Qubit-Paar vorliegt.

Eine speziell an die Anforderungen des NMR Quantencomputing angepasste Methode wurde von Linden et. al. [36] vorgeschlagen. Diese hat jedoch den Nachteil, dass der nötige Aufwand an Zeit und an der Anzahl von Pulsen exponentiell mit der Anzahl der Spins wächst. Inzwischen wurde auch ein effizientes Verfahren gefunden, bei der der Aufwand nur polynomial wächst [37, 38].

Ähnliche Methoden wurden auch vorgeschlagen, um die Dekohärenz zu verringern, die durch die Wechselwirkungen des Systems mit seiner Quanten-Umgebung entsteht [11].

Die obengenannten Verfahren gehen davon aus, dass zwischen den Spins eine schwache J -Kopplung besteht. Das ist allerdings nur eine Näherung. Deshalb soll im Folgenden untersucht werden, ob sich diese Methoden auch auf allgemeine Wechselwirkungen, insbesondere auch auf starke J -Kopplung, erweitern lassen. Dabei soll eine vollständige Entkopplung des Systems erreicht werden, alle Wechselwirkungen sollen entfernt werden. Insbesondere soll auch das Verhalten bei wachsender Systemgröße untersucht werden.

5.2. Grundlagen

5.2.1. Entwicklung eines Spinsystems unter einer Pulsfolge

Die Verfahren zur Entkopplung von Wechselwirkungen in einem Spinsystem sind eine Weiterentwicklung der gepulsten Kernspinresonanz. Dabei wird auf das betrachtete System eine Folge von Radiopulsen mit dazwischenliegenden Intervallen natürlicher Entwicklung unter dem internen Hamiltonoperator angewendet. Durch ein geschicktes „Design“ der Pulsfolgen lassen sich verschiedene effektive Hamilton-Operatoren realisieren, bei denen bestimmte Terme unterdrückt sind. Dies dient in der konventionellen NMR vor allem dazu, eine höhere Auflösung der erhaltenen Spektren zu erzielen.

Im Folgenden soll angegeben werden, wie sich ein Spinsystem unter dem Einfluss einer solchen Pulsfolge verhält [39, 40]. Dabei werden der Einfachheit halber ideale δ -Pulse angenommen, d. h. die Pulse wirken während einer beliebig kurzen Zeit

und müssen dementsprechend beliebig intensiv werden. Das kann natürlich in der Praxis nicht realisiert werden, ist aber eine gute Näherung für sogenannte „harte“ Pulse. Die Annahme hat den rechen-technischen Vorteil, dass die entsprechenden Operatoren instantan wirken und alle anderen Wechselwirkungen während eines Pulses vernachlässigt werden können.

Die Wirkung eines solchen δ -Pulses auf einen Spin lässt sich durch den unitären Operator

$$\hat{P} = e^{-i\theta\mathbf{n}\hat{I}} \quad (5.1)$$

beschreiben, dabei ist $\theta = \gamma B_1 t_P$ der Drehwinkel und \mathbf{n} die Drehachse. Wegen des speziellen experimentellen Aufbaus der üblichen NMR-Experimente können dabei nur Pulse um die x - und y -Achse direkt realisiert werden. Aus diesen Pulsen können aber Pulse um alle möglichen Drehachsen und Winkel zusammengesetzt werden.

Eine Pulsfolge ist definiert durch eine Reihe von verschiedenen Pulsen, die in bestimmten Zeitabständen auf das System wirken. Sie soll durch folgende Schreibweise gekennzeichnet werden:

$$(\tau_n, \hat{P}_n, \dots, \tau_1, \hat{P}_1) \quad (5.2)$$

Das bedeutet, der Ausgangszustand des Spinsystems $|\psi_0\rangle$ wird durch den ersten Puls \hat{P}_1 in den Zustand $|\psi_1\rangle$ überführt, dann entwickelt sich das System frei unter dem internen Hamiltonoperator \mathcal{H} für die Zeit τ_1 . Danach befindet sich das System im Zustand $|\psi_2\rangle$. Dann folgt der zweite Puls \hat{P}_2 und freie Entwicklung für τ_2 und so weiter.

Den Zustand kurz vor dem $(n+1)$ ten Puls erhält man dann zu

$$|\psi\rangle = \left(\prod_{k=1}^n e^{-i\mathcal{H}\tau_k} \hat{P}_k \right) |\psi_0\rangle \quad (5.3)$$

wobei das Produkt so sortiert ist, dass k von rechts nach links zunimmt. (Diese Konvention soll für das ganze Kapitel gelten). Durch wiederholtes Einfügen von Termen der Form $\hat{P}_k \hat{P}_k^{-1} = \hat{1}$ kann man diese Gleichung auch schreiben als

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \dots e^{-i\mathcal{H}\tau_3} \hat{P}_3 e^{-i\mathcal{H}\tau_2} \hat{P}_2 e^{-i\mathcal{H}\tau_1} \hat{P}_1 |\psi_0\rangle \\ &= \dots e^{-i\mathcal{H}\tau_3} (\hat{P}_3 \hat{P}_2 \hat{P}_1) (\hat{P}_1^{-1} \hat{P}_2^{-1}) e^{-i\mathcal{H}\tau_2} (\hat{P}_2 \hat{P}_1) \hat{P}_1^{-1} e^{-i\mathcal{H}\tau_1} \hat{P}_1 |\psi_0\rangle \end{aligned} \quad (5.4)$$

Das kann vereinfacht werden mit

$$\begin{aligned} \hat{P}^{-1} e^{\hat{A}} \hat{P} &= \hat{P}^{-1} \left(1 + \hat{A} + \frac{1}{2!} \hat{A}^2 + \frac{1}{3!} \hat{A}^3 + \dots \right) \hat{P} \\ &= 1 + \hat{P}^{-1} \hat{A} \hat{P} + \frac{1}{2!} (\hat{P}^{-1} \hat{A} \hat{P})^2 + \frac{1}{3!} (\hat{P}^{-1} \hat{A} \hat{P})^3 + \dots \\ &= e^{\hat{P}^{-1} \hat{A} \hat{P}} \end{aligned} \quad (5.5)$$

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

Und man erhält

$$|\psi\rangle = \left(\prod_{l=1}^n \hat{P}_l \right) \prod_{k=1}^n e^{-i\mathcal{H}_k \tau_k} |\psi_0\rangle \quad (5.6)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_k &= \left(\prod_{l=1}^k \hat{P}_l \right)^{-1} \mathcal{H} \left(\prod_{l=1}^k \hat{P}_l \right) \\ &= \hat{Q}_k^{-1} \mathcal{H} \hat{Q}_k \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$\text{wobei} \quad \hat{Q}_k = \prod_{l=1}^k \hat{P}_l \quad (5.8)$$

Das bedeutet, dass sich das System unter der Pulsfolge so verhält, als würde in jedem Zeitintervall k ein transformierter interner Hamiltonoperator \mathcal{H}_k vorliegen. Die Transformation \hat{Q}_k ist dabei gegeben durch die bis dahin „kumulierten“ Pulse. Hier sollen nur zyklische Pulsfolgen betrachtet werden, d. h. $\prod_{l=1}^n \hat{P}_l = 1$. Das bedeutet, dass nach Beendigung der Folge der interne Hamiltonian wieder in seinen Ausgangszustand zurückkehrt und die Folge mit dem gleichen Effekt auf das Spinsystem wiederholt werden kann. Die Dauer eines Zyklus (cycle time) ist dann gegeben durch

$$t_c = \sum_{k=1}^n \tau_k \quad (5.9)$$

In diesem Fall vereinfacht sich (5.6), und man erhält für den Zustand zur Zeit t_c , also nach Beendigung eines Zyklus

$$|\psi\rangle = \prod_{k=1}^n e^{-i\mathcal{H}_k \tau_k} |\psi_0\rangle \quad (5.10)$$

Wenn der Zustand des Systems nur an Zeiten gemessen werden soll, die ein Vielfaches von t_c sind („stroboskopische“ Beobachtung), erhält man die Zeitentwicklung durch wiederholte Anwendung von $\hat{U}(t_c) = \prod_{k=1}^n e^{-i\mathcal{H}_k \tau_k}$ auf das Spinsystem.

Im Folgenden werden hauptsächlich Pulsfolgen betrachtet, bei denen die Pulse in gleichmäßigen Abständen angelegt werden, d. h. alle τ_k haben die gleiche Länge t_c/n . Eine solche Folge soll als $n\tau$ -Pulsfolge bezeichnet werden.

Für eine zyklische 4τ -Pulsfolge der Form

$$(\tau, \hat{P}_4, \tau, \hat{P}_3, \tau, \hat{P}_2, \tau, \hat{P}_1)$$

erhält man die folgenden transformierten Hamiltonians

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \hat{P}_1^{-1} \mathcal{H} \hat{P}_1 \\ \mathcal{H}_2 &= (\hat{P}_2 \hat{P}_1)^{-1} \mathcal{H} (\hat{P}_2 \hat{P}_1) \\ \mathcal{H}_3 &= (\hat{P}_3 \hat{P}_2 \hat{P}_1)^{-1} \mathcal{H} (\hat{P}_3 \hat{P}_2 \hat{P}_1) \\ \mathcal{H}_4 &= (\hat{P}_4 \hat{P}_3 \hat{P}_2 \hat{P}_1)^{-1} \mathcal{H} (\hat{P}_4 \hat{P}_3 \hat{P}_2 \hat{P}_1) = \mathcal{H} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Eine für die folgenden Betrachtungen nützlichere Schreibweise zur Beschreibung einer Pulsfolge ist nicht die Angabe der tatsächlich auf die Spins angewendeten einzelnen Radiopulse, sondern die Angabe der während der verschiedenen Zeitintervalle vorliegenden Transformationen \hat{Q} bzw. der jeweils vorliegenden transformierten Hamiltonians. Für obiges Beispiel also

$$(\hat{Q}_1 \hat{Q}_2 \hat{Q}_3 \hat{1}) \quad \text{oder} \quad (\mathcal{H}_1 \mathcal{H}_2 \mathcal{H}_3 \mathcal{H}) \quad (5.12)$$

5.2.2. Average Hamiltonian Theory (AHT)

Die „Average Hamiltonian Theory“ (AHT) [39, 32, 40] ist eine nützliche Methode, um die Zeitentwicklung eines Systems zu beschreiben, das einem zeitabhängigen Hamiltonoperator unterliegt. Ziel ist es, eine Zeitentwicklung, wie sie in (5.10) auftritt, durch einen einzelnen Exponentialoperator zu beschreiben. Ein Zeitentwicklungsoperator

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_c) &= \prod_{k=1}^n e^{-i\mathcal{H}_k \tau_k} \\ &= e^{-i\mathcal{H}_n \tau_n} e^{-i\mathcal{H}_{n-1} \tau_{n-1}} \dots e^{-i\mathcal{H}_1 \tau_1} \end{aligned} \quad (5.13)$$

soll also geschrieben werden als $\hat{U}(t_c) = e^{-i\hat{F}t_c}$. Wenn alle \mathcal{H}_k kommutieren, lässt sich \hat{F} sofort angeben als $\hat{F} = 1/t_c \sum_k \mathcal{H}_k \tau_k$. Da dies im Allgemeinen aber nicht der Fall sein wird, muss eine allgemeinere Formel für \hat{F} gefunden werden. Dazu wird die Magnus-Entwicklung [32] benutzt, bei der angenommen wird, dass sich \hat{F} als Summe von Hamiltonians verschiedener Größenordnung schreiben lässt:

$$\hat{F} = \bar{\mathcal{H}} + \bar{\mathcal{H}}^{(1)} + \bar{\mathcal{H}}^{(2)} + \dots \quad (5.14)$$

Um die Operatoren $\bar{\mathcal{H}}^{(i)}$ zu erhalten, werden die Exponentialfunktionen unter der Annahme, dass $\mathcal{H}_k \tau_k$ eine kleine Größe ist, in Potenzreihen entwickelt. Wenn man dann die Terme gleicher Größenordnung zusammenfasst, erhält man die sogenannten Average Hamiltonians iter Ordnung

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}} &= \frac{1}{t_c} (\mathcal{H}_1 \tau_1 + \mathcal{H}_2 \tau_2 + \mathcal{H}_3 \tau_3 + \dots) \\ &= \frac{1}{t_c} \sum_k \mathcal{H}_k \tau_k \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}^{(1)} &= -\frac{i}{2t_c} ([\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1] \tau_2 \tau_1 + [\mathcal{H}_3, \mathcal{H}_1] \tau_3 \tau_1 + [\mathcal{H}_3, \mathcal{H}_2] \tau_3 \tau_2 + \dots) \\ &= -\frac{i}{2t_c} \sum_{j>k} [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] \tau_j \tau_k \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}^{(2)} &= -\frac{1}{6t_c} ([\mathcal{H}_3 \tau_3, [\mathcal{H}_2 \tau_2, \mathcal{H}_1 \tau_1]] + [[\mathcal{H}_3 \tau_3, \mathcal{H}_2 \tau_2], \mathcal{H}_1 \tau_1] \\ &\quad + \frac{1}{2} [\mathcal{H}_2 \tau_2, [\mathcal{H}_2 \tau_2, \mathcal{H}_1 \tau_1]] + \frac{1}{2} [[\mathcal{H}_2 \tau_2, \mathcal{H}_1 \tau_1], \mathcal{H}_1 \tau_1] + \dots) \end{aligned} \quad (5.17)$$

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

Für den Rest des Kapitels soll hauptsächlich der Spezialfall betrachtet werden, dass alle τ_k die gleiche Länge t_c/n haben. Das heißt die Pulse werden in gleichmäßigen Abständen angelegt. In diesem Fall gilt

$$\begin{aligned}\bar{\mathcal{H}} &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathcal{H}_k \\ \bar{\mathcal{H}}^{(1)} &= -\frac{it_c}{2n^2} \sum_{j>k} [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k]\end{aligned}\quad (5.18)$$

Der Zeitentwicklungsoperator kann also genähert werden mit dem Average Hamiltonian nullter Ordnung, der auch einfach nur als „Average Hamiltonian“ bezeichnet wird:

$$\hat{U}(t_c) \approx e^{-i\bar{\mathcal{H}}t_c} \quad (5.19)$$

Diese Gleichung ist exakt erfüllt, wenn alle \mathcal{H}_k kommutieren. Das ist jedoch im Allgemeinen nicht gegeben. Die Abweichung wird beschrieben durch die Korrekturterme steigender Ordnung $\bar{\mathcal{H}}^{(i)}$.

Es soll noch hinzugefügt werden, dass für symmetrische Pulsfolgen, das heißt $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(t_c - t)$, alle Korrekturterme ungerader Ordnung verschwinden

$$\bar{\mathcal{H}}^{(k)} = 0 \quad \text{für } k \text{ ungerade} \quad (5.20)$$

Das wird oft ausgenutzt, um die Effizienz von Pulsfolgen zu erhöhen, indem die Folgen so entworfen werden, dass ein möglichst hoher Grad an Symmetrie vorliegt [41].

5.2.3. Beispiel: Average Hamiltonian für eine 2τ -Folge

Als Beispiel soll eine starke J -Kopplung zwischen zwei Spins betrachtet werden. Der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator ist dann (vgl. (4.10))

$$\mathcal{H}^w = J(\hat{\sigma}_x^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_x^{(2)} + \hat{\sigma}_y^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(2)} + \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)}) \quad (5.21)$$

(Die Zeeman-Terme sollen hier nicht betrachtet werden.) Auf das Spinsystem soll folgende Pulsfolge wirken

$$(\hat{Z}^{(2)}, \tau, \hat{Z}^{(2)}, \tau) \quad (5.22)$$

Man erhält dann folgende transformierten Hamiltonians

$$\begin{aligned}\hat{Q}_1 &= \hat{1} & \mathcal{H}_1 &= J(\hat{\sigma}_x^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_x^{(2)} + \hat{\sigma}_y^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(2)} + \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)}) \\ \hat{Q}_2 &= \hat{Z}^{(2)} \hat{1} = \hat{Z}^{(2)} & \mathcal{H}_2 &= J(-\hat{\sigma}_x^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_x^{(2)} - \hat{\sigma}_y^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(2)} + \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)})\end{aligned}\quad (5.23)$$

Und damit für den Average Hamiltonian

$$\bar{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2) = J \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)} \quad (5.24)$$

Dabei ist $[\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2] = 0$, also gilt $\hat{U}(t_c) = e^{-i\bar{\mathcal{H}}t_c}$ exakt. (Das gilt allerdings im Allgemeinen nicht mehr, wenn auch Zeeman-Terme vorhanden sind.) Das System verhält sich also genau so wie ein schwach gekoppeltes System, solange man Beobachtungen nur an Zeiten $t = rt_c$, $r \in \mathbb{N}$, durchführt. Diese Folge bewirkt also praktisch eine Transformation von einer starken zu einer schwachen J -Kopplung.

5.2.4. Wirkung von Pulsen auf Spinoperatoren

Wie in den vorigen Abschnitten gezeigt, kann ein Spinsystem, das sich unter einer Pulsfolge entwickelt, durch transformierte Hamiltonoperatoren beschrieben werden. Die Pulse sind dabei unitäre Operatoren. In der $SU(n)$ -Darstellung [42] können die Pauli-Spinoperatoren als Basis verwendet werden. Deswegen sollen hier unitäre Transformationen dieser Spinoperatoren betrachtet werden. Wichtig für spätere Betrachtungen sind besonders die Transformationen, die sich aus der Anwendung von π -Pulsen ergeben.

Allgemeine unitäre Operation

Eine allgemeine unitäre Transformation in $SU(2)$ lässt sich durch eine Rotation in einem 3-dimensionalen Vektorraum beschreiben [42]. Für die Transformation eines Spinoperators $\hat{\sigma}_i$ mit $i = 1, 2, 3$ gilt

$$\hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_i \hat{U} = \sum_{k=1}^3 R_{ik} \hat{\sigma}_k \quad (5.25)$$

dabei ist $\sigma_1 = \hat{\sigma}_x$, $\sigma_2 = \hat{\sigma}_y$ und $\sigma_3 = \hat{\sigma}_z$. R ist eine reelle Rotationsmatrix. Im Folgenden soll speziell R für π -Pulse um die Koordinatenachsen abgeleitet werden.

π -Pulse um Koordinatenachsen

Für π -Pulse um die x -Achse erhält man den entsprechenden Operator zu

$$\begin{aligned} \hat{P} &= e^{\frac{i}{2}\theta\hat{\sigma}_x} \\ &= \cos\frac{\theta}{2} \hat{1} + i \sin\frac{\theta}{2} \hat{\sigma}_x \end{aligned} \quad (5.26)$$

Das gilt analog auch für Pulse um die y - und z -Achse. Die später betrachteten Pulsfolgen verwenden hauptsächlich π -Pulse um die Koordinatenachsen, die mit \hat{X} , \hat{Y} und \hat{Z} bezeichnet werden sollen. Aus (5.26) erhält man für diesen Fall

$$\begin{aligned} \hat{X} &= i \hat{\sigma}_x \\ \hat{Y} &= i \hat{\sigma}_y \\ \hat{Z} &= i \hat{\sigma}_z \end{aligned} \quad (5.27)$$

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

\hat{Q}	\hat{A}								
	$\hat{\sigma}_x^{(1)}$	$\hat{\sigma}_y^{(1)}$	$\hat{\sigma}_z^{(1)}$	$\hat{\sigma}_x^{(2)}$	$\hat{\sigma}_y^{(2)}$	$\hat{\sigma}_z^{(2)}$	$\hat{\sigma}_x^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_x^{(2)}$	$\hat{\sigma}_y^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(2)}$	$\hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)}$
$\hat{1}$	+	+	+	+	+	+	+	+	+
$\hat{X}^{(1)}$	+	-	-	+	+	+	+	-	-
$\hat{Y}^{(1)}$	-	+	-	+	+	+	-	+	-
$\hat{Z}^{(1)}$	-	-	+	+	+	+	-	-	+
$\hat{X}^{(2)}$	+	+	+	+	-	-	+	-	-
$\hat{Y}^{(2)}$	+	+	+	-	+	-	-	+	-
$\hat{Z}^{(2)}$	+	+	+	-	-	+	-	-	+
$\hat{X}^{(1)}\hat{X}^{(2)}$	+	-	-	+	-	-	+	+	+
$\hat{Y}^{(1)}\hat{Y}^{(2)}$	-	+	-	-	+	-	+	+	+
$\hat{Z}^{(1)}\hat{Z}^{(2)}$	-	-	+	-	-	+	+	+	+
$\hat{X}^{(1)}\hat{Y}^{(2)}$	+	-	-	-	+	-	-	-	+
\vdots									

Tabelle 5.1.: Wirkung verschiedener Pulse auf Spinoperatoren:
Vorzeichen in $\hat{A}' = \hat{Q}^{-1}\hat{A}\hat{Q} = \pm\hat{A}$

Aus den Eigenschaften der Pauli-Spinoperatoren ($\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_j = \hat{1}$, $[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k]_+ = 2\delta_{jk}\hat{1}$, $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z$) ergeben sich folgende Beziehungen

$$\begin{aligned}
 \hat{X}\hat{X} &= -\hat{1} & \hat{X}^{-1} &= -\hat{X} \\
 \hat{X}\hat{Y} &= -\hat{Y}\hat{X} & & \text{und zyklisch} \\
 \hat{X}\hat{Y} &= -\hat{Z} & & \text{und zyklisch}
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

Die Pulse in einer Pulsfolge führen zu einer Transformation eines Terms \hat{A} gemäß der Transformationsvorschrift

$$\hat{A}' = \hat{Q}^{-1}\hat{A}\hat{Q} \tag{5.29}$$

Ein x -Puls auf $\hat{\sigma}_z$ führt so zu

$$\begin{aligned}
 \hat{X}^{-1}\hat{\sigma}_z\hat{X} &= \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = -\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z \\
 &= -\hat{\sigma}_z
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

Allgemein bewirkt eine Transformation eines Spinoperators mit einem π -Puls einen Vorzeichenwechsel, wenn Puls und Spinoperator verschieden sind (siehe dazu auch Tabelle 5.1).

Die Transformationsmatrizen R in (5.25) sind also für π -Pulse gegeben durch

$$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad R_y = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad R_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.31}$$

mit den folgenden Eigenschaften

$$R^T = R \quad R^2 = 1 \quad R_x R_y = R_y R_x = R_z \quad \text{und zyklisch} \quad (5.32)$$

5.2.5. Entkopplung bei schwacher J -Kopplung nach Leung

Leung et al. [37] und unabhängig davon auch Jones und Knill [38] haben eine Pulsfolge zum Entkoppeln von Spins beschrieben, die mit schwacher J -Kopplung wechselwirken. Der Wechselwirkungshamiltonian für ein Zwei-Spin-System ist dann

$$\mathcal{H}^w = J \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)} \quad (5.33)$$

Die Spins können mit selektiven π -Pulsen um die x -Achse entkoppelt werden. Die verwendete 2τ -Pulsfolge ist

$$(\hat{X}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(2)}, \tau) \quad (5.34)$$

Man erhält dann für die transformierten Hamiltonians

$$\begin{aligned} \hat{Q}_1 &= \hat{1} & \mathcal{H}_1 &= J \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)} \\ \hat{Q}_2 &= \hat{X}^{(2)} \hat{1} = \hat{X}^{(2)} & \mathcal{H}_2 &= -J \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)} \end{aligned} \quad (5.35)$$

und damit für den Average Hamiltonian

$$\bar{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2) = 0 \quad (5.36)$$

Da in diesem Fall \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 kommutieren, liefert $\bar{\mathcal{H}}$ die exakte Zeitentwicklung, und ein perfektes Entkoppeln ist möglich.

Die Verallgemeinerung auf N Spins macht sich die Eigenschaften von Hadamard-Matrizen zunutze. Das Problem ist deswegen sehr komplex, weil für ein vollständig gekoppeltes System für alle möglichen Paare von Spins ein Wechselwirkungsterm vorhanden ist. Um zu entkoppeln, muss jeder Term $\hat{\sigma}_z^{(i)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(j)}$ für genau die Hälfte der Zeitintervalle negativ werden. Wenn man den Term $\hat{\sigma}_z^{(i)}$ mit $+1$ bezeichnet und den transformierten Term $\hat{X}^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{X}^{(i)} = -\hat{\sigma}_z^{(i)}$ mit -1 , kann man die Zustände in den verschiedenen Intervallen in einer Matrix notieren. Man erhält dann

$$\begin{array}{l} \text{Spin 1} \\ \text{Spin 2} \end{array} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

wobei die Zeilen für die zwei Spins stehen und die Spalten für die zwei Zeitintervalle. Der Bedingung für das Entkoppeln der Wechselwirkung zwischen den beiden Spins entspricht dann die Orthogonalität der Zeilenvektoren. Das Problem, geeignete Pulsfolgen zu finden, die jedes mögliche Spinpaar entkoppeln, kann nun auf das Problem zurückgeführt werden, genügend große Matrizen mit

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

den Elementen 1 und -1 zu konstruieren, bei denen alle Zeilenvektoren zueinander orthogonal sind. Dies sind gerade die Hadamard-Matrizen. Diese zu finden ist allerdings nicht trivial, und es existiert auch nicht für jedes N eine Hadamard-Matrix. Eine notwendige Voraussetzung ist, dass N ein Vielfaches von 4 ist (Ausnahme $N = 2$), diese Bedingung ist aber nicht hinreichend für die Existenz einer Hadamard-Matrix. Für $N = 4$ lautet sie zum Beispiel

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.38)$$

Damit können bis zu vier Spins entkoppelt werden. Um drei Spins zu entkoppeln, verwendet man einfach nur drei der vier Zeilen. Mit den Eigenschaften der Hadamard-Matrizen konnten Leung et al. zeigen, dass zum Entkoppeln von N schwach gekoppelten Spins eine $(cN)\tau$ -Folge notwendig ist, wobei $c < 2$ ist und von N abhängt. In den meisten Fällen liegt c nahe bei 1.

5.3. Entkopplung einer allgemeinen Wechselwirkung

Die bisherigen Veröffentlichungen haben sich nur mit dem Entkoppeln von schwacher J -Kopplung befasst. Dies ist allerdings nur eine Näherung. Eine interessante Frage ist, ob sich auch allgemeine Wechselwirkungen durch ähnliche Methoden entkoppeln lassen, oder ob es bestimmte Bedingungen gibt, die die Wechselwirkung erfüllen muss.

In diesem Zusammenhang ist auch die Frage nach der Selektivität der Pulse von Bedeutung. In der konventionellen NMR werden keine spin-selektiven Pulse verwendet, sondern solche, die global auf alle Spins wirken. Hingegen werden bei den bisher diskutierten Methoden für QC nur selektive Pulse betrachtet, d. h. einzelne Spins werden als adressierbar angenommen. Das ist eine starke Einschränkung, da dann v. a. in homonuklearen Systemen, wo die Rabi-Frequenzen der verschiedenen Spins sehr nah beieinander liegen können, sehr weiche Pulse notwendig werden. Das heißt, die Pulsdauer wird vergleichsweise lang, und damit ist die Annahme instantaner Pulse, während derer alle anderen Wechselwirkungen vernachlässigbar sind, nur noch eingeschränkt gültig. Es wäre also sehr vorteilhaft, wenn eine Entkopplung auch durch globale Pulse bewirkt werden könnte.

Diese Fragen sollen hier bei einer allgemeinen Zwei-Teilchen-Wechselwirkung geklärt werden.

5.3.1. Unitäre Transformation von Wechselwirkungshamiltonians

Um Aussagen darüber machen zu können, ob eine allgemeine Wechselwirkung entkoppelt werden kann, muss zuerst betrachtet werden, wie sich die entsprechenden Hamiltonians verhalten, wenn ein allgemeiner Pulsoperator, und damit eine allgemeine unitäre Transformation, auf sie wirkt. Daraus kann dann abgeleitet werden, welche effektiven Hamiltonoperatoren im Sinne der AHT für ein gegebenes System und eine gegebene Entkopplungsmethode realisiert werden können. Dazu soll eine allgemeine Zwei-Teilchen-Wechselwirkung \mathcal{H}^w durch eine 3×3 -Wechselwirkungsmatrix \mathbf{H} mit den Elementen H_{ij} geschrieben werden als

$$\mathcal{H}^w = \sum_{i,j=1}^3 H_{ij} \hat{\sigma}_i \otimes \hat{\sigma}_j \quad (5.39)$$

Während einer Pulsfolge verhält sich das System dann so, als ob in einem bestimmten Zeitintervall ein unitär transformierter Hamiltonian \mathcal{H}' vorliegt. Die Transformation soll gegeben sein als $\hat{U} = \hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2$, mit $\hat{U}_1^{-1} = \hat{U}_1^\dagger$ und $\hat{U}_2^{-1} = \hat{U}_2^\dagger$. \mathcal{H}' erhält man dann mit (5.25) als

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \hat{U}^\dagger \mathcal{H}^w \hat{U} \\ &= \sum_{i,j=1}^3 H_{ij} (\hat{U}_1^\dagger \hat{\sigma}_i \hat{U}_1) \otimes (\hat{U}_2^\dagger \hat{\sigma}_j \hat{U}_2) \\ &= \sum_{i,j=1}^3 H_{ij} \left(\sum_{k=1}^3 R_{ik}^{(1)} \hat{\sigma}_k \right) \otimes \left(\sum_{l=1}^3 R_{jl}^{(2)} \hat{\sigma}_l \right) \\ &= \sum_{ijkl} H_{ij} R_{ik}^{(1)} R_{jl}^{(2)} \hat{\sigma}_k \otimes \hat{\sigma}_l \\ &= \sum_{kl} H'_{kl} \hat{\sigma}_k \otimes \hat{\sigma}_l \end{aligned} \quad (5.40)$$

$$\text{mit } H'_{kl} = \sum_{ij} (R^{(1)})_{ki}^T H_{ij} R_{jl}^{(2)} \quad (5.41)$$

Die unitäre Transformation des Hamiltonoperators \mathcal{H}^w lässt sich also durch eine (nicht notwendig orthogonale) Transformation der Wechselwirkungsmatrix beschreiben. Dabei gilt für die Wechselwirkungsmatrix des transformierten Hamiltonians das folgende Transformationsverhalten

$$\mathbf{H}' = (\mathbf{R}^{(1)})^T \mathbf{H} \mathbf{R}^{(2)} \quad (5.42)$$

Man kann nun zwei Fälle unterscheiden, einmal den Fall einer globalen, nicht-selektiven Anregung, bei der auf alle Spins die gleiche unitäre Transformation

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

wirkt. Dies ist das in der konventionellen NMR übliche Szenario. Der zweite Fall ist spin-selektive Anregung, bei der in der Regel unterschiedliche Pulse auf verschiedene Spins wirken oder Pulse nur auf bestimmte Spins angewandt werden. Globale Pulse lassen sich experimentell einfacher realisieren, da dann harte, relativ kurze Pulse verwendet werden können. So erhält man also mit $\hat{U}_1 = \hat{U}_2$, und damit $\mathbf{R}^{(1)} = \mathbf{R}^{(2)} = \mathbf{R}$, für nicht-selektive Pulse

$$\mathbf{H}' = \mathbf{R}^T \mathbf{H} \mathbf{R} \quad (5.43)$$

und es folgt

Satz 5.1 *Die Wechselwirkungsmatrix \mathbf{H} transformiert bei selektiven Pulsen auf Spin 1 bzw. Spin 2 gemäß*

$$\mathbf{H}' = (\mathbf{R}^{(1)})^T \mathbf{H} \mathbf{R}^{(2)} \quad (5.44)$$

Bei nicht-selektiven (globalen) Pulsen transformiert \mathbf{H} wie ein Tensor bei Drehung

$$\mathbf{H}' = \mathbf{R}^T \mathbf{H} \mathbf{R} \quad (5.45)$$

In diesem Fall gilt Spurerhaltung der Wechselwirkungsmatrix, $\text{Sp } \mathbf{H}' = \text{Sp } \mathbf{H}$.

Transformation bei diagonalem \mathbf{H} und \mathbf{R}

Später wird insbesondere auch der Fall betrachtet, dass \mathbf{H} eine diagonale Matrix ist. Eine Wechselwirkung mit dieser Eigenschaft soll als „diagonale Wechselwirkung“ bezeichnet werden. Wenn auch $\mathbf{R}^{(i)}$ diagonal ist, so lässt sich (5.42) vereinfachen zu

$$\begin{aligned} \mathbf{H}' &= (\mathbf{R}^{(1)})^T \mathbf{H} \mathbf{R}^{(2)} \\ &= \mathbf{R}^{(1)} \mathbf{R}^{(2)} \mathbf{H} \\ &\equiv \mathbf{R} \mathbf{H} \end{aligned} \quad (5.46)$$

Entscheidend ist also nur das Produkt der beiden Rotationsmatrizen $\mathbf{R}^{(1)}$ und $\mathbf{R}^{(2)}$ und nicht ihre spezielle Form.

5.3.2. Average Hamiltonian für eine allgemeine Wechselwirkung

Aus den transformierten Hamiltonians erhält man mit (5.15) den Average Hamiltonian

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}^w &= \frac{1}{t_c} \sum_{k=1}^n \mathcal{H}_k^w \tau_k \\ &= \sum_{i,j=1}^3 \bar{H}_{ij} \hat{\sigma}_i \otimes \hat{\sigma}_j \end{aligned} \quad (5.47)$$

5.3. Entkopplung einer allgemeinen Wechselwirkung

der sich wieder mit einer Wechselwirkungsmatrix \bar{H} schreiben lässt.

$$\bar{H} = \frac{1}{t_c} \sum_k H_k \tau_k \quad (5.48)$$

$$\bar{H} = \frac{1}{n} \sum_k H_k \quad \text{für } \tau_k = \tau \quad (5.49)$$

Die transformierten Wechselwirkungsmatrizen H_k erhält man dabei mit Satz 5.1 aus den entsprechenden Transformationsmatrizen $R_k^{(i)}$.

Für den Fall, dass nur Pulse auf ausschließlich einen der beiden Spins verwendet werden oder dass sowohl H als auch R diagonale Matrizen sind, lässt sich H_k schreiben als $H_k = R_k H$. Dann lässt sich \bar{H} vereinfachen zu

$$\bar{H} = \frac{1}{n} \left(\sum_k R_k \right) H \quad (5.50)$$

5.3.3. Selektivität

Mit den eben abgeleiteten Ergebnissen für das Transformationsverhalten von Wechselwirkungsmatrizen kann man nun die Frage beantworten, unter welchen Umständen eine allgemeine Wechselwirkung entkoppelt werden kann. Da globale Pulse einfacher zu realisieren sind, und da selektive Pulse besonders bei Systemen mit großer Spinzahl große Probleme hervorrufen, ist eine interessante Frage, ob eine beliebige Wechselwirkung durch globale Pulse entkoppelt werden kann, oder ob selektive Pulse notwendig sind.

In diesem Abschnitt wird zunächst ein notwendiges Kriterium dafür gegeben, dass eine Wechselwirkung mit globalen Pulsen entkoppelt werden kann, und im nächsten Abschnitt werden dann spezielle Pulsfolgen angegeben, die dazu geeignet sind, alle Systeme, die dieses Kriterium erfüllen, zu entkoppeln.

Wenn alle H_k durch Anwendung von nicht-selektiven Pulsen aus \mathcal{H}_w hervorgehen, haben sie wegen Satz 5.1 alle dieselbe Spur $\text{Sp} H$. Es gilt deshalb auch für den Average Hamiltonian

$$\text{Sp} \bar{H} = \text{Sp} H \quad (5.51)$$

Das System vollständig zu entkoppeln bedeutet, einen verschwindenden Average Hamiltonian zu erreichen, also muss $\bar{H} = 0$ und somit $\text{Sp} \bar{H} = 0$ gelten. Eine Entkopplung ist also nur möglich, wenn $\text{Sp} H$ verschwindet.

Satz 5.2 *Eine Wechselwirkung mit $\text{Sp} H \neq 0$ kann nicht durch nicht-selektive Pulse entkoppelt werden.*

Dieser Satz stellt also eine Einschränkung dafür dar, welche Wechselwirkungen durch globale Pulse entkoppelt werden können. Einige Beispiele dazu:

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

- $\text{Sp H} = 0$ gilt z. B. für Dipolkopplung. Globale Pulse können also dazu verwendet werden, Dipolkopplungen zu entfernen. Das wird in der konventionellen NMR durchgeführt mit Pulsfolgen wie z. B. WAHUHA, MREV oder BLEW [40].
- $\text{Sp H} \neq 0$ gilt z. B. für schwache und starke J -Kopplung ($\mathcal{H}_{weak} \propto \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z$, $\mathcal{H}_{strong} \propto \hat{\sigma} \otimes \hat{\sigma}$) oder XY-Kopplung. Diese Kopplungen können also nur durch selektive Pulse entkoppelt werden.

5.3.4. Pulsfolgen für $N = 2$

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, dass $\text{Sp H} = 0$ nicht nur eine notwendige Bedingung dafür ist, dass eine Wechselwirkung durch nicht-selektive Pulse entkoppelt werden kann, sondern auch hinreichend für symmetrische Wechselwirkungen. Ferner wird eine selektive 4τ -Folge angegeben, die jede beliebige Zwei-Teilchen-Wechselwirkung der hier betrachteten Form entkoppeln kann.

Nicht-selektive Pulse

Zunächst soll gezeigt werden, wie eine Wechselwirkung mit globalen Pulsen entkoppelt werden kann. Eine diagonale Wechselwirkung $\mathcal{H}^w = \text{diag}(J_x, J_y, J_z)$, für die $\text{Sp H} = J_x + J_y + J_z = 0$ gilt, kann mit nicht-selektiven Pulsen entkoppelt werden. Dazu kann eine Pulsfolge mit $2\pi/3$ -Pulsen um die $[111]$ -Achse verwendet werden. Die entsprechende Rotationsmatrix ist gegeben durch

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.52)$$

Mit der Pulsfolge

$$(\hat{R}, \tau, \hat{R}, \tau, \hat{R}, \tau)$$

erhält man die transformierten Hamiltonians

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_1 = \mathbf{H} &= \text{diag}(J_x, J_y, J_z) \\ \mathbf{H}_2 = \mathbf{R}^T \mathbf{H} \mathbf{R} &= \text{diag}(J_y, J_z, J_x) \\ \mathbf{H}_3 = \mathbf{R}^T \mathbf{R}^T \mathbf{H} \mathbf{R} \mathbf{R} &= \text{diag}(J_z, J_x, J_y) \end{aligned} \quad (5.53)$$

und damit

$$\bar{\mathbf{H}} = \left(\frac{1}{3} \text{Sp H} \right) \mathbf{1} = 0 \quad (5.54)$$

Eine allgemeine symmetrische Wechselwirkung ($\mathbf{H}^T = \mathbf{H}$) kann ebenfalls mit dieser Folge entkoppelt werden, indem man zuerst durch nicht-selektive Pulse die Wechselwirkungsmatrix auf Diagonalgestalt transformiert und dann die obige Pulsfolge für diagonale Wechselwirkungen anwendet.

5.3. Entkopplung einer allgemeinen Wechselwirkung

Selektive Pulse

Im Folgenden wird gezeigt, dass jede allgemeine Wechselwirkung zwischen zwei Spins mit selektiven π -Pulsen entkoppelt werden kann. Dazu kann man die Pulsfolge (1XYZ) auf einen der beiden Spins anwenden. Das heißt, die auf diesen Spin wirkenden kumulierten Pulsoperatoren \hat{Q} sind $\hat{1}$, \hat{X} , \hat{Y} und \hat{Z} . Das entspricht den Rotationsmatrizen $\mathbf{1}$, \mathbf{R}_x , \mathbf{R}_y und \mathbf{R}_z . Für den Average Hamiltonian erhält man dann (5.50):

$$\bar{\mathbf{H}} = \frac{1}{n} \left(\sum_k \mathbf{R}_k^{(1)} \right)^T \mathbf{H} \quad \text{bzw.} \quad \bar{\mathbf{H}} = \frac{1}{n} \mathbf{H} \left(\sum_k \mathbf{R}_k^{(2)} \right) \quad (5.55)$$

und mit

$$\sum_k \mathbf{R}_k = \mathbf{1} + \mathbf{R}_x + \mathbf{R}_y + \mathbf{R}_z = 0 \quad (5.56)$$

folgt für $\bar{\mathbf{H}}$

$$\bar{\mathbf{H}} = 0 \quad (5.57)$$

Eine mögliche Pulsfolge ist z. B.

$$(-\hat{Y}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(2)}, \tau, \hat{Y}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(2)}, \tau) \quad (5.58)$$

was den Transformationen (1XZY) entspricht. Die Reihenfolge spielt für den Average Hamiltonian nullter Ordnung keine Rolle, allerdings können die Korrekturterme dadurch beeinflusst werden. Diese spezielle Folge bietet sich an, weil keine z -Pulse nötig sind, die in der NMR nicht direkt realisiert werden können. Für diagonales \mathbf{H} führt diese Folge im Einzelnen zu folgenden transformierten Hamiltonians:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_1 &= \mathbf{H} = \text{diag}(J_x, J_y, J_z) \\ \mathbf{H}_2 &= \mathbf{R}_x \mathbf{H} = \text{diag}(J_x, -J_y, -J_z) \\ \mathbf{H}_3 &= \mathbf{R}_z \mathbf{H} = \text{diag}(-J_x, -J_y, J_z) \\ \mathbf{H}_4 &= \mathbf{R}_y \mathbf{H} = \text{diag}(-J_x, J_y, -J_z) \end{aligned} \quad (5.59)$$

Dann gilt Gleichung (5.46), also

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{R}_k \mathbf{H} \quad \text{mit} \quad \mathbf{R}_k = \mathbf{R}_k^{(1)} \mathbf{R}_k^{(2)}$$

Somit hat man mehr Freiheit in der Wahl der Pulsfolgen. Man kann die Pulse beliebig auf beide Spins verteilen oder gleichzeitige Pulse auf beide Spins verwenden. Das ist insbesondere nützlich bei mehr als zwei Spins, da dadurch kürzere Folgen ermöglicht werden (siehe Abschnitt 5.4.2).

Eine mögliche Pulsfolge für diagonale Wechselwirkung ist

$$(\hat{Y}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(1)}, \tau, \hat{Y}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(1)}, \tau)$$

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

Der Vorteil dieser Folge gegenüber (5.58) ist, dass nicht nur die Kopplung zwischen den Spins entfernt wird, sondern auch alle Zeeman-Terme. Auf diese Folge wird in Abschnitt 5.5 noch näher eingegangen werden.

Zusammenfassend gilt also: Jede Wechselwirkung zwischen zwei Spins ist durch eine selektive 4τ -Pulsfolge entkoppelbar. Dazu kann die Folge (5.58) verwendet werden. Für spezielle Wechselwirkungen, wie zum Beispiel schwache J -Kopplung oder Kopplungen mit $\text{Sp H} = 0$, können auch einfachere Folgen gefunden werden. Im folgenden Abschnitt wird die Verallgemeinerung auf N Spins betrachtet.

5.4. Entkopplung von $N > 2$ Spins

Die Ergebnisse des letzten Abschnitts für ein System aus zwei wechselwirkenden Spins sollen hier auf ein größeres System übertragen werden. Dabei soll zuerst der relativ komplexe Fall eines vollständig gekoppelten Systems betrachtet werden, d. h. jeder Spin erfährt eine Wechselwirkung mit allen anderen. Auf den in der Praxis häufiger auftretenden Fall, dass nur Kopplungen mit einer begrenzten Anzahl von Nachbarn vorliegen, soll dann später eingegangen werden.

Für N Spins lautet der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator allgemein

$$\mathcal{H}^w = \sum_{\mu \neq \nu}^N \sum_{i,j=1}^3 H_{ij}^{\mu\nu} \hat{\sigma}_i^{(\mu)} \otimes \hat{\sigma}_j^{(\nu)} \quad (5.60)$$

Wenn man auf das System eine unitäre Transformation $\hat{U} = \bigotimes_{\mu} \hat{U}_{\mu}$ wirken lässt, erhält man analog zum Fall von $N = 2$ Spins

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \sum_{\mu \neq \nu}^N \sum_{i,j=1}^3 H_{ij}^{\mu\nu} R_{ik}^{\mu} R_{jl}^{\nu} \hat{\sigma}_k^{(\mu)} \otimes \hat{\sigma}_l^{(\nu)} \\ &= \sum_{\mu \neq \nu}^N \sum_{k,l=1}^3 H_{kl}^{\mu\nu} \hat{\sigma}_k^{(\mu)} \otimes \hat{\sigma}_l^{(\nu)} \end{aligned} \quad (5.61)$$

Damit erhält man für den Average Hamiltonian

$$\bar{\mathcal{H}}^w = \sum_{\mu \neq \nu}^N \sum_{i,j=1}^3 \bar{H}_{ij}^{\mu\nu} \hat{\sigma}_i \otimes \hat{\sigma}_j \quad (5.62)$$

$$\bar{H}^{\mu\nu} = \frac{1}{t_c} \sum_k H_k^{\mu\nu} \tau_k \quad (5.63)$$

mit

$$H_k^{\mu\nu} = (R_k^{\mu})^T H^{\mu\nu} R_k^{\nu} \quad (5.64)$$

Wegen der Linearität von \mathcal{H}^w in sämtlichen Wechselwirkungstermen sind die Ergebnisse für $N = 2$ also direkt übertragbar.

Für diagonale $H^{\mu\nu}$ und R_k^μ erhält man dann:

$$\begin{aligned} H_k^{\mu\nu} &= R_k^{\mu\nu} H^{\mu\nu} \\ R_k^{\mu\nu} &= R_k^\mu R_k^\nu \end{aligned} \quad (5.65)$$

5.4.1. Entkopplung mit nicht-selektiven Pulsfolgen

Zunächst soll der Fall betrachtet werden, dass mit globalen Pulsen entkoppelt werden soll. Für die den Pulsen entsprechenden Transformationsmatrizen gilt also $R_k^\mu = R_k^\nu = R_k$. Damit folgt für die transformierten Hamiltonians

$$H_k^{\mu\nu} = R_k^T H^{\mu\nu} R_k \quad (5.66)$$

Wenn also alle $H^{\mu\nu}$ die Bedingung $\text{Sp } H^{\mu\nu} = 0$ erfüllen und jeweils für sich durch die gewählte Pulsfolge entkoppelt werden können, so entkoppelt das gesamte System. Insbesondere gilt das für den Fall, dass alle $H^{\mu\nu}$ identisch sind (von einem skalaren Faktor abgesehen). Wenn dann die Pulsfolge für zwei Spins funktioniert, so funktioniert sie für eine beliebige Anzahl Spins. Ein Beispiel ist ein System, in dem alle Spins durch Dipol-Kopplungen miteinander wechselwirken.

5.4.2. Entkopplung mit selektiven Pulsfolgen

Nun soll ein System betrachtet werden, bei dem die Kopplungen nicht durch globale Pulse beseitigt werden können. In diesem Fall wird das Problem komplexer, da die einfachen Zwei-Spin-Folgen hier nicht mehr ausreichen, anders als bei global entkoppelbaren Wechselwirkungen. Als Beispiel soll zunächst ein System aus drei Spins betrachtet werden. Wenn man die Pulsfolge (1XYZ) auf Spin 2 anwendet, werden zwar die Wechselwirkungen zwischen Spin 1 und 2 und zwischen Spin 2 und 3 entkoppelt, aber nicht die zwischen Spin 1 und 3. Denn der Wechselwirkungsterm zwischen Spin 1 und 3 „sieht“ eine globale Folge, da auf beide Spins dieselben Transformationen wirken (nämlich die identische Transformation). Daraus folgt sofort, dass auf jeden Spin eine unterschiedliche Folge wirken muss (das ist natürlich keine hinreichende Bedingung). Geeignete Folgen zu finden ist kein triviales Problem, besonders wenn man fordert, dass sie möglichst kurz sein sollen.

Im Folgenden sollen einige Ansätze gegeben werden.

Notation

Die Notation folgt der in [37, 38] verwendeten Schreibweise. Die Pulsfolgen werden als Matrizen geschrieben. Die oben erwähnte 4τ -Folge für drei Spins hat dann die

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

folgende Darstellung

$$\begin{array}{l} \text{Spin 1} \\ \text{Spin 2} \\ \text{Spin 3} \end{array} \quad \begin{array}{c} \longrightarrow k \\ \left(\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & X & Y & Z \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right) \end{array}$$

Jede Zeile entspricht dabei einem Spin und jede Spalte einem Zeitintervall. Eine $n\tau$ -Folge für N Spins wird also als $N \times n$ -Matrix geschrieben. Die Elemente geben jeweils an, welche Transformation zu einem bestimmten Zeitpunkt auf einen bestimmten Spin wirkt, X entspricht dabei $\hat{Q}_k = \hat{X}$ und einer Transformationsmatrix R_x .

Verschachtelung von Pulsfolgen

Diese Methode ist die einfachste Möglichkeit und entspricht der in [36] für schwache Wechselwirkung beschriebenen Methode. Für drei Spins erhält man als eine mögliche Folge

$$\left(\begin{array}{cccccccccccccccc} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & X & X & X & X & Z & Z & Z & Z & Y & Y & Y & Y \\ 1 & X & Z & Y & Y & Z & X & 1 & 1 & X & Z & Y & Y & Z & X & 1 \end{array} \right) \quad (5.67)$$

Das entspricht den folgenden transformierten Hamiltonians

k	R_k^1	H_k^{12}	R_k^2	H_k^{23}	R_k^3	H_k^{31}	R_k^1
1	1	H	1	H	1	H	1
2	1	H	1	HR_x	X	$R_x H$	1
3	1	H	1	HR_z	Z	$R_z H$	1
4	1	H	1	HR_y	Y	$R_y H$	1
5	1	HR_x	X	$R_x HR_y$	Y	$R_y H$	1
6	1	HR_x	X	$R_x HR_z$	Z	$R_z H$	1
7	1	HR_x	X	$R_x HR_x$	X	$R_x H$	1
8	1	HR_x	X	$R_x H$	1	H	1
9	1	HR_z	Z	$R_z H$	1	H	1
10	1	HR_z	Z	$R_z HR_x$	X	$R_x H$	1
11	1	HR_z	Z	$R_z HR_z$	Z	$R_z H$	1
12	1	HR_z	Z	$R_z HR_y$	Y	$R_y H$	1
13	1	HR_y	Y	$R_y HR_y$	Y	$R_y H$	1
14	1	HR_y	Y	$R_y HR_z$	Z	$R_z H$	1
15	1	HR_y	Y	$R_y HR_x$	X	$R_x H$	1
16	1	HR_y	Y	$R_y H$	1	H	1
\bar{H}		0		0		0	

(5.68)

5.4. Entkopplung von $N > 2$ Spins

Das Prinzip ist eine rekursive Schachtelung der elementaren Pulsfolge, hier z. B. (1XZY). Wenn das System um einen Spin vergrößert wird, wird auf den zusätzlichen Spin in jedem Zeitintervall der ursprünglichen Folge ein ganzer Zyklus angewendet. Da alle anderen Spins während dieses Intervalls unverändert sind, erhält man jeweils ein $\bar{H}^{\mu, N+1}$ der Form

$$\begin{aligned}\bar{H}^{\mu, N+1} &= \frac{1}{4}(R_k^\mu H^{\mu, N+1} + R_k^\mu H^{\mu, N+1} R_x + R_k^\mu H^{\mu, N+1} R_z + R_k^\mu H^{\mu, N+1} R_y) \\ &= \frac{1}{4} R_k^\mu H^{\mu, N+1} (1 + R_x + R_y + R_z) = 0\end{aligned}\quad (5.69)$$

Der zusätzliche Spin entkoppelt also mit allen anderen Spins.

Diese Methode funktioniert für beliebige $H^{\mu\nu}$, die auch alle voneinander verschieden sein können. Das Vertauschen der Reihenfolge bei jedem zweiten Zyklus ist nicht notwendig, führt aber zu der zusätzlichen schönen Eigenschaft, dass gleichzeitige Pulse auf verschiedene Spins vermieden werden. Die entsprechende Pulsfolge ist

$$\begin{aligned}(\hat{Y}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(3)}, \tau, \hat{Y}^{(3)}, \tau, \hat{X}^{(3)}, \tau, \hat{X}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(3)}, \tau, \hat{Y}^{(3)}, \tau, \hat{X}^{(3)}, \tau, \\ \hat{Y}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(3)}, \tau, \hat{Y}^{(3)}, \tau, \hat{X}^{(3)}, \tau, \hat{X}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(3)}, \tau, \hat{Y}^{(3)}, \tau, \hat{X}^{(3)}, \tau)\end{aligned}$$

Gleichzeitige Pulse auf mehrere Spins können insbesondere für homonukleare Systeme ein Problem darstellen [43].

Diese Methode hat allerdings den erheblichen Nachteil, dass der Aufwand an Zeitintervallen und Pulsen schnell mit der Anzahl Spins anwächst. Für N Spins benötigt man eine $4^{N-1}\tau$ -Folge und genau so viele einzelne Pulse. Der Aufwand wächst also exponentiell an.

Effizientes Schema mit Hadamard-Matrizen

Hier soll eine Methode angegeben werden, die effizient ist in dem Sinne, dass der nötige Aufwand nicht exponentiell mit N wächst. Sie beruht auf der effizienten Methode von Leung und Jones und Knill für schwache J -Kopplung.

Die elementare Folge (1XZY) kann als eine Schachtelung von zwei 2τ -Folgen interpretiert werden, es gilt nämlich

$$\begin{aligned}\text{für } \tau' &= \hat{X}\tau\hat{X}\tau \\ \hat{Z}\tau'\hat{Z}\tau' &= \hat{Y}\tau\hat{X}\tau\hat{Y}\tau\hat{X}\tau\end{aligned}\quad (5.70)$$

Das entspricht (5.58). Eine Entkopplung kann also bewirkt werden, indem man eine Entkopplung mit einer Folge von z -Pulsen macht und in jedem Zeitschritt dieser Folge eine Entkopplung mit x -Pulsen durchführt. Für N Spins benutzt man Hadamard-Matrizen wie bei einer Entkopplung von schwacher J -Kopplung (vgl. Abschnitt 5.2.5), allerdings verwendet man z -Transformationen, bei denen

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

während jedes Zeitschritts eine vollständige Entkopplung mit x -Transformationen durchgeführt wird. Die entsprechenden Pulsfolgen für 4 Spins sind (vgl. (5.38))

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & Z & Z \\ 1 & Z & Z & 1 \\ 1 & Z & 1 & Z \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & X & X \\ 1 & X & X & 1 \\ 1 & X & 1 & X \end{pmatrix} \quad (5.71)$$

Für 4 Spins kann man so folgende Pulsfolge konstruieren

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & X & X & 1 & 1 & X & X & Z & Z & Y & Y & Z & Z & Y & Y \\ 1 & X & X & 1 & Z & Y & Y & Z & Z & Y & Y & Z & 1 & X & X & 1 \\ 1 & X & 1 & X & Z & Y & Z & Y & 1 & X & 1 & X & Z & Y & Z & Y \end{pmatrix} \quad (5.72)$$

Diese Folge entkoppelt tatsächlich alle Wechselwirkungen. Entsprechend lassen sich für beliebige Spinanzahl auch Pulsfolgen aus $n \times n$ -Hadamard-Matrizen ableiten. *Beweis:* Die Pulsfolge für einen gegebenen Spin i ergibt sich aus den entsprechenden Zeilenvektoren der z -Transformations-Matrix, \mathbf{i} , und der x -Transformations-Matrix, \mathbf{i}' , zu

$$(i_1 i'_1 \quad i_1 i'_2 \quad \dots \quad i_1 i'_n \quad i_2 i'_1 \quad \dots \quad i_n i'_1 \quad \dots \quad i_n i'_n) \quad (5.73)$$

Für den Average Hamiltonian der Wechselwirkung zwischen zwei Spins i und j erhält man dann (j_μ und j'_ν sind diagonale Matrizen und kommutieren somit)

$$\bar{H}^{ij} = \frac{1}{n^2} \sum_{\mu=1}^n i_\mu \left(\sum_{\nu=1}^n i'_\nu H^{ij} j'_\nu \right) j_\mu \quad (5.74)$$

Aus den Eigenschaften der Hadamard-Matrizen folgt, dass sich alle auftretenden Kombinationen i, j durch Umordnen und Zusammenfassen von Zeitintervallen auf folgende zwei Fälle zurückführen lassen:

- $\begin{pmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & Z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{i}' \\ \mathbf{j}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & X \end{pmatrix}.$

(Dieser Fall entspricht (5.70)). Durch Einsetzen in (5.74) und Ausnutzung von $XX = 1, XY = Z$, usw. folgt

$$\bar{H}^{ij} = \frac{1}{4} H^{ij} (1 + R_x + R_y + R_z) = 0 \quad (5.75)$$

- $\begin{pmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & Z & Z \\ 1 & Z & 1 & Z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{i}' \\ \mathbf{j}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & X & X \\ 1 & X & 1 & X \end{pmatrix}.$

In diesem Fall erhält man

$$\bar{H}^{ij} = \frac{1}{16} (1 + R_x + R_y + R_z) H^{ij} (1 + R_x + R_y + R_z) = 0 \quad (5.76)$$

5.4. Entkopplung von $N > 2$ Spins

Eine beliebige Wechselwirkung wird also entkoppelt. \square

Um N Spins entkoppeln zu können, benötigt man die kleinste Hadamard-Matrix, deren Dimension größer oder gleich N ist. Dabei existiert auf jeden Fall eine Hadamard-Matrix der Dimension $n = cN$, wobei $c < 2$ gilt. Durch die Verschachtelung erhält man dann eine Pulsfolge mit $(cN)^2$ Zeitschritten. Die Anzahl der benötigten Pulse ist daher kleiner als $c^2 N^3$.

Die Pulsfolge kann also eine beliebige Wechselwirkung mit polynomialem Aufwand entkoppeln und ist somit effizient. Dieser Vorteil ist allerdings damit verbunden, dass gleichzeitige Pulse auf verschiedene Spins verwendet werden müssen.

Effizientes Schema für diagonale Wechselwirkungen

Für diagonale Wechselwirkungsmatrizen kann sogar ein noch effizienteres Schema angegeben werden. Dann gilt (5.65):

$$H_k^{\mu\nu} = R_k^{\mu\nu} H^{\mu\nu} \quad R_k^{\mu\nu} = R_k^\mu R_k^\nu$$

Man erhält also die Transformation, die auf H wirkt, aus der elementweisen Multiplikation der Zeilenvektoren, die den entsprechenden Spins entsprechen, wobei $XX = 1, XY = Z$, usw. Die transformierten Wechselwirkungsmatrizen sollen mit $H_x = R_x H$ usw. bezeichnet werden.

Damit erhält man für die Folge (5.67)

k	R_k^1	H_k^{12}	R_k^2	H_k^{23}	R_k^3	H_k^{31}	R_k^1
1	1	H_0	1	H_0	1	H_0	1
2	1	H_0	1	H_x	X	H_x	1
3	1	H_0	1	H_x	Z	H_z	1
4	1	H_0	1	H_y	Y	H_y	1
5	1	H_x	X	H_z	Y	H_y	1
6	1	H_x	X	H_y	Z	H_z	1
7	1	H_x	X	H_0	X	H_x	1
8	1	H_x	X	H_x	1	H_0	1
9	1	H_z	Z	H_z	1	H_0	1
10	1	H_z	Z	H_y	X	H_x	1
11	1	H_z	Z	H_0	Z	H_z	1
12	1	H_z	Z	H_x	Y	H_y	1
13	1	H_y	Y	H_0	Y	H_y	1
14	1	H_y	Y	H_x	Z	H_z	1
15	1	H_y	Y	H_z	X	H_x	1
16	1	H_y	Y	H_y	1	H_0	1
\bar{H}	0	0	0	0	0	0	0

Die Bedingung für das Entkoppeln der Wechselwirkung zwischen zwei Spins ist

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

dann, dass der resultierende Vektor die gleiche Anzahl an 1, X , Y und Z -Transformationen enthält, oder anders formuliert

Satz 5.3 *Zwei durch eine diagonale Wechselwirkung gekoppelte Spins entkoppeln unter einer Pulsfolge, wenn das Skalarprodukt der entsprechenden Zeilenvektoren der „Entkopplungsmatrix“ gleich Null ist, wobei gilt: $1 + X + Y + Z = 0$. Eine Pulsfolge entkoppelt also dann alle Wechselwirkungen in einem vollständig gekoppelten System, wenn alle Zeilenvektoren der dazugehörigen Matrix orthogonal zueinander sind.*

Die Matrizen (5.67) und (5.72) erfüllen diese Bedingung. Es gibt aber auch Pulsfolgen, die zu einer geringeren Anzahl an benötigten Zeitschritten führen. Die eigentliche Aufgabe ist es jetzt, Matrizen mit den Elementen 1, X , Y , Z zu finden, die die Entkopplungsbedingung erfüllen und zu möglichst wenigen Zeitschritten führen. Eine mögliche Pulsfolge für 4 Spins, die kürzer ist als die bisher verwendeten, ist

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & X & Y & Z \\ 1 & Y & Z & X \\ 1 & Z & X & Y \end{pmatrix} \quad (5.78)$$

Zu dieser Matrix kann keine weitere Zeile hinzugefügt werden, die zu allen anderen orthogonal ist. Durch Überprüfen aller Möglichkeiten lässt sich ferner zeigen, dass $N = 4$ die größte Anzahl von Spins ist, die mit einer 4τ -Folge entkoppelt werden kann. Um zwei oder drei Spins zu entkoppeln, verwendet man einfach nur die entsprechende Anzahl an Zeilen.

Durch Ausprobieren aller möglichen Permutationen können auch Matrizen für 8 und für 12 Zeitintervalle gefunden werden, die jeweils 8 bzw. 12 Spins entkoppeln können, siehe Tafeln 5.2 und 5.3. Solche $N \times N$ -Matrizen („Entkopplungsmatrizen“) sollen mit M_N bezeichnet werden. Folgende Eigenschaften der Entkopplungsmatrizen sind zu beachten:

- Zeilen und Spalten können beliebig permutiert werden, ohne dass die Entkopplungseigenschaft verloren geht.
- Die Matrix, die entsteht, wenn bei einer Entkopplungsmatrix eine Spalte mit einer der Transformationen multipliziert wird, ist wieder eine Entkopplungsmatrix (wegen $XX = 1, \dots$). Alle möglichen Matrizen können also in einer Normalform geschrieben werden, bei der die erste Zeile nur aus Einsen besteht.
- Nicht alle möglichen Matrizen lassen sich durch diese Transformationen in dieselbe Normalform bringen, insbesondere gibt es z. B. 8τ -Matrizen mit 4 Zeilen, zu der keine weitere orthogonale Zeile hinzugefügt werden kann.

5.4. Entkopplung von $N > 2$ Spins

- Bei einer Matrix in Normalform müssen alle außer der ersten Zeile jeweils eine Permutation der gleichen Zahl von 1-, X-, Y- und Z-Transformationen sein. Damit kann der Suchraum deutlich reduziert werden. Daraus folgt ferner, dass nur $4r\tau$ -Folgen existieren können, mit $r \in \mathbb{N}$.

$$M_8 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & X & X & Y & Y & Z & Z \\ 1 & X & Y & Z & 1 & X & Y & Z \\ 1 & X & Z & Y & Y & Z & X & 1 \\ 1 & Y & 1 & Y & Z & X & Z & X \\ 1 & Y & X & Z & X & Z & 1 & Y \\ 1 & Z & Y & X & Z & 1 & X & Y \\ 1 & Z & Z & 1 & X & Y & Y & X \end{pmatrix}$$

Tabelle 5.2.: Beispiel für eine 8τ -Folge

$$M_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & X & X & X & Y & Y & Y & Z & Z & Z \\ 1 & 1 & 1 & Y & Y & Y & Z & Z & Z & X & X & X \\ 1 & X & Y & X & Y & Z & 1 & X & Z & 1 & Y & Z \\ 1 & X & Y & Y & Z & X & X & Z & 1 & Y & Z & 1 \\ 1 & X & Y & Z & X & Y & Z & 1 & X & Z & 1 & Y \\ 1 & Y & Z & 1 & X & Z & X & Y & Z & Y & 1 & X \\ 1 & Y & Z & X & Z & 1 & Y & Z & X & 1 & X & Y \\ 1 & Y & Z & Z & 1 & X & Z & X & Y & X & Y & 1 \\ 1 & Z & X & 1 & Z & Y & Y & X & 1 & Z & Y & X \\ 1 & Z & X & Y & 1 & Z & 1 & Y & X & X & Z & Y \\ 1 & Z & X & Z & Y & 1 & X & 1 & Y & Y & X & Z \end{pmatrix}$$

Tabelle 5.3.: Beispiel für eine 12τ -Folge

Daraus folgt also, dass Systeme mit bis zu 4 Spins mit einer 4τ -Folge entkoppelt werden können, Systeme mit bis zu 8 bzw. 12 Spins mit einer 8 bzw. 12τ -Folge. Die Vermutung liegt nahe, dass für alle $r \in \mathbb{N}$ eine Matrix M_{4r} existiert, dass also alle Systeme mit $N = 4r$ Spins durch eine $N\tau$ -Folge entkoppelt werden können. Ein Beweis konnte jedoch nicht gefunden werden. Im Folgenden wird aber gezeigt werden, dass zumindest für alle $N = 2^r$, mit $r \geq 2$, eine Matrix M_N konstruiert werden kann.

Für den Beweis wird folgender Satz verwendet, der dem Satz von Sylvester [37] über Hadamard-Matrizen entspricht

Satz 5.4 *Gegeben sind zwei Entkopplungsmatrizen M_{n_1} und M_{n_2} . Das dyadische Produkt $M_{n_1 n_2} = M_{n_1} \otimes M_{n_2}$ ist wieder eine Entkopplungsmatrix.*

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

Beweis: Die $(n_2(i-1) + k)$ te Zeile ($i = 1, \dots, n_1, k = 1, \dots, n_2$) der neuen Matrix $M_{n_1 n_2}$, (i, k) , geht aus dem i -ten Zeilenvektor von M_{n_1} , \mathbf{i} , und dem k -ten Zeilenvektor von M_{n_2} , \mathbf{k} , hervor

$$(i, k) = (i_1 k_1 \quad i_1 k_2 \quad \dots \quad i_1 k_{n_2} \quad \dots \quad i_{n_1} k_1 \quad \dots \quad i_{n_1} k_{n_2}) \quad (5.79)$$

Für das Skalarprodukt zwischen zwei Zeilen (i, k) und (j, l) von $M_{n_1 n_2}$ gilt dann

$$\begin{aligned} (i, k) \cdot (j, l) &= i_1 j_1 k_1 l_1 + i_1 j_1 k_2 l_2 + \dots + i_1 j_1 k_{n_2} l_{n_2} + \dots + i_{n_1} j_{n_1} k_{n_2} l_{n_2} \\ &= i_1 j_1 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}) + \dots + i_{n_1} j_{n_1} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}) \\ &= (\mathbf{i} \cdot \mathbf{j})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}) \end{aligned}$$

Da in M_{n_1} und M_{n_2} alle Zeilen zueinander orthogonal sind, kann $(i, k) \cdot (j, l)$ also nur ungleich Null werden für $j = i, l = k$. Also sind auch alle Zeilenvektoren von $M_{n_1 n_2}$ zueinander orthogonal. \square

So kann man aus M_4 die Matrix M_{16} konstruieren, siehe Tafel 5.4. Insbesondere ist es mittels der bereits angegebenen Matrizen M_4 und M_8 möglich, Matrizen M_N zu konstruieren für alle $N = 2^r$, mit $r \geq 2$. Das heißt, dass für N Spins eine Folge benötigt wird mit cN Zeitschritten, wobei $c < 2$. Der Aufwand an Zeitschritten ist also linear in N , und die Anzahl der benötigten Pulse ist kleiner als $(cN)^2$.

Es ist für diagonale Wechselwirkungen also möglich, Pulsfolgen zu konstruieren, bei denen der Aufwand nur linear mit der Anzahl der Spins wächst. Dazu sind allerdings gleichzeitige Pulse auf verschiedene miteinander koppelnde Spins nötig.

Zum Entkoppeln der Zeeman-Terme

Die bisherigen Pulsfolgen entfernen die Wechselwirkungsterme zwischen allen Spins, allerdings wird der Zeeman-Term des ersten Spins nicht entfernt. Zur Entfernung des Zeeman-Terms $\propto \hat{\sigma}_z$ ist es notwendig, dass genau zur Hälfte der Zeit 1- oder Z -Transformationen vorliegen und zur anderen Hälfte X - oder Y -Transformationen. Dann hat der Term genau zur Hälfte der Zeit negatives Vorzeichen und wird somit refokussiert. Um ein vollständiges Entkoppeln inklusive aller Zeeman-Terme zu erreichen, kann man eine Folge benutzen, die $N + 1$ Spins entkoppeln kann. Von dieser Folge wird dann die erste Zeile nicht verwendet.

Partiell gekoppelte Systeme

In der Praxis wird man häufig kein vollständig gekoppeltes System vorliegen haben. In vielen Fällen sind die Wechselwirkungen räumlich sehr begrenzt, so dass ein Spin praktisch nur mit k nahen Nachbarn wechselwirkt und Wechselwirkungen zu weiter entfernten Spins vernachlässigt werden können. In diesem Fall reicht eine viel kürzere Folge aus [38].

5.5. Beispiel: „Do-Nothing-Sequence“ (DNS)

$$M_{16} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & X & Y & Z & 1 & X & Y & Z & 1 & X & Y & Z & 1 & X & Y & Z \\ 1 & Y & Z & X & 1 & Y & Z & X & 1 & Y & Z & X & 1 & Y & Z & X \\ 1 & Z & X & Y & 1 & Z & X & Y & 1 & Z & X & Y & 1 & Z & X & Y \\ 1 & 1 & 1 & 1 & X & X & X & X & Y & Y & Y & Y & Z & Z & Z & Z \\ 1 & X & Y & Z & X & 1 & Z & Y & Y & Z & 1 & X & Z & Y & X & 1 \\ 1 & Y & Z & X & X & Z & Y & 1 & Y & 1 & X & Z & Z & X & 1 & Y \\ 1 & Z & X & Y & X & Y & 1 & Z & Y & X & Z & 1 & Z & 1 & Y & X \\ 1 & 1 & 1 & 1 & Y & Y & Y & Y & Z & Z & Z & Z & X & X & X & X \\ 1 & X & Y & Z & Y & Z & 1 & X & Z & Y & X & 1 & X & 1 & Z & Y \\ 1 & Y & Z & X & Y & 1 & X & Z & Z & X & 1 & Y & X & Z & Y & 1 \\ 1 & Z & X & Y & Y & X & Z & 1 & Z & 1 & Y & X & X & Y & 1 & Z \\ 1 & 1 & 1 & 1 & Z & Z & Z & Z & X & X & X & X & Y & Y & Y & Y \\ 1 & X & Y & Z & Z & Y & X & 1 & X & 1 & Z & Y & Y & Z & 1 & X \\ 1 & Y & Z & X & Z & X & 1 & Y & X & Z & Y & 1 & Y & 1 & X & Z \\ 1 & Z & X & Y & Z & 1 & Y & X & X & Y & 1 & Z & Y & X & Z & 1 \end{pmatrix}$$

Tabelle 5.4.: Beispiel für eine 16 τ -Folge

Bei einer Spinkette mit Wechselwirkungen bis zum k -ten Nachbarn reicht eine Pulsfolge für $k + 1$ Spins aus, wobei dann auf jeden $(k + 1)$ ten Spin dieselbe Folge angewendet wird. Insbesondere lässt sich eine Spinkette mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung durch eine Folge für zwei Spins entkoppeln. In Abschnitt 5.5 wird auf eine spezielle Folge für diesen Fall noch näher eingegangen werden.

Selektives Recoupling

Durch geringe Modifikationen können auch hier, genauso wie bei Leung für schwache Kopplung diskutiert, Pulsfolgen konstruiert werden, die alle Kopplungen „aus-schalten“ und dann eine oder mehrere Kopplungen gezielt wieder „einschalten“. Das kann man einfach dadurch erreichen, dass man auf die beiden Spins, die nicht entkoppelt werden sollen, denselben Zeilenvektor anwendet.

5.5. Beispiel: „Do-Nothing-Sequence“ (DNS)

Für den Rest dieses Kapitels soll eine Spinkette mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung betrachtet werden. Die Wechselwirkung soll dabei diagonal sein (diagonales H), der Sonderfall der starken J -Kopplung ist darin mit enthalten. Eine spezielle Pulsfolge zum vollständigen Entkoppeln wird angegeben und näher untersucht. Dabei soll in den folgenden Abschnitten insbesondere auch auf den Einfluss der Korrekturterme in der Magnus-Entwicklung eingegangen werden.

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

Der betrachtete Hamiltonoperator für N Spins hat dann die Form:

$$\mathcal{H} = - \sum_{k=1}^N \nu_k \hat{\sigma}_z^{(k)} + \sum_{k=1}^{N-1} \left(J_x^k \hat{\sigma}_x^{(k)} \hat{\sigma}_x^{(k+1)} + J_y^k \hat{\sigma}_y^{(k)} \hat{\sigma}_y^{(k+1)} + J_z^k \hat{\sigma}_z^{(k)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)} \right) \quad (5.80)$$

Wie bereits gesagt, genügt für Nächster-Nachbar-Wechselwirkung eine Pulsfolge für zwei Spins, wobei jeweils auf jeden zweiten Spin dieselben Pulse angewandt werden. Die folgende Pulsfolge, die mit DNS (Do-Nothing-Sequence) bezeichnet werden soll, bewirkt eine vollständige Entkopplung einschließlich der Zeeman-Terme

$$(\hat{Y}^{(g)}, \tau, \hat{X}^{(u)}, \tau, \hat{Y}^{(g)}, \tau, \hat{X}^{(u)}, \tau) \quad (5.81)$$

Dabei bedeutet $\hat{X}^{(u)}$ einen x -Puls auf die Spins mit ungerader Nummer und entsprechend $\hat{Y}^{(g)}$ einen y -Puls auf die Spins mit gerader Nummer. Dieser Folge entspricht die Entkopplungsmatrix

$$\begin{array}{c} \text{Spin 1} \\ \text{Spin 2} \\ \text{Spin 3} \\ \vdots \end{array} \begin{pmatrix} 1 & X & X & 1 \\ 1 & 1 & Y & Y \\ 1 & X & X & 1 \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \quad (5.82)$$

Die transformierten Terme in den verschiedenen Zeitintervallen sind in Tabelle 5.5 aufgelistet. Diese spezielle Folge hat folgende Vorteile

- Nur x - und y -Pulse werden verwendet, jedoch keine z -Pulse, die in der NMR nicht direkt erzeugt werden können, sondern aus einem gleichzeitigen x - und y -Puls zusammengesetzt werden müssten.
- Es gibt keine gleichzeitigen Pulse auf direkt miteinander gekoppelte Spins.

k	$\hat{Q}_k^{(u)}$	$\hat{Q}_k^{(g)}$	$\hat{\sigma}_z^{(u)}$	$\hat{\sigma}_z^{(g)}$	$\hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_x$	$\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y$	$\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z$
1	$\hat{1}$	$\hat{1}$	+	+	+	+	+
2	\hat{X}	$\hat{1}$	-	+	+	-	-
3	\hat{X}	\hat{Y}	-	-	-	-	+
4	$\hat{1}$	\hat{Y}	+	-	-	+	-
Summe			0	0	0	0	0

Tabelle 5.5.: Wechselwirkungsterme während DNS

Diese Folge führt zu $\bar{\mathcal{H}} = 0$, d. h. in nullter Ordnung entfernt DNS alle Wechselwirkungen. Für schwache J -Kopplung kommutieren dabei alle Terme der transformierten Hamiltonians in den verschiedenen Zeitintervallen, und es wird ein perfektes Entkoppeln erzielt. Für allgemeine Kopplungskonstanten kommutieren

5.5. Beispiel: „Do-Nothing-Sequence“ (DNS)

die transformierten Hamiltonians in der Regel nicht mehr, und deswegen ist die Entkopplung nicht perfekt. Auf die Abweichung von einem ideal entkoppelten System soll im Folgenden näher eingegangen werden.

Für die Korrekturen erster Ordnung ist $\tilde{\mathcal{H}}^{(1)}$ wesentlich, vergleiche (5.18). Der entscheidende Term ist $\hat{S} = \sum_{j>k}^4 [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k]$. Durch vollständige Induktion in N erhält man für $J_x^k = J_x$, $J_y^k = J_y$ und $J_z^k = J_z$

$$\hat{S} = 8i \left\{ J_x J_y \sum_{k=1}^{N-2} (\hat{\sigma}_x^{(k)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)} \hat{\sigma}_y^{(k+2)} + \hat{\sigma}_y^{(k)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)} \hat{\sigma}_x^{(k+2)}) + \sum_{k=1}^{N-1} (\delta_{ku} a_k \hat{\sigma}_y^{(k)} \hat{\sigma}_x^{(k+1)} + \delta_{kg} b_k \hat{\sigma}_x^{(k)} \hat{\sigma}_y^{(k+1)}) \right\} \quad (5.83)$$

mit

$$a_k = \nu_k J_x + \nu_{k+1} J_y \quad b_k = \nu_k J_y + \nu_{k+1} J_x \quad (5.84)$$

Insbesondere verschwindet \hat{S} wie erwartet für den Fall schwacher J -Kopplung ($J_x = J_y = 0$). Für die weiteren Betrachtungen werden die Diagonalelemente von \hat{S} und \hat{S}^2 in der Produktbasis benötigt. Diese sollen im verbleibenden Teil dieses Abschnitts berechnet werden. Ein allgemeiner Produktzustand der Spinkette lässt sich schreiben als

$$|\mathbf{j}\rangle = |j_1 j_2 \dots j_N\rangle = |j_1\rangle |j_2\rangle \dots |j_N\rangle \quad (5.85)$$

wobei $j_k = 0, 1$. Für die Wirkung der Spinoperatoren auf Zustände eines Einzelteilchen-Zustands $|j\rangle$ gelten folgende Beziehungen

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x |j\rangle &= |1-j\rangle \\ \hat{\sigma}_y |j\rangle &= i(2j-1) |1-j\rangle \\ \hat{\sigma}_z |j\rangle &= (2j-1) |j\rangle \end{aligned} \quad (5.86)$$

Da jeder Summand in \hat{S} einen auf Spin k wirkenden Operator $\hat{\sigma}_x$ oder $\hat{\sigma}_y$ beinhaltet, folgt für die Diagonalelemente

$$\langle \mathbf{j} | \hat{S} | \mathbf{j} \rangle = 0 \quad (5.87)$$

Durch vollständige Induktion in N erhält man ferner für die Diagonalelemente von \hat{S}^2

$$\langle \mathbf{j} | \hat{S}^2 | \mathbf{j} \rangle = -128 J_x^2 J_y^2 (N-2 + K_j) - 64 \sum_{k=1}^{N-1} (\delta_{ku} a_k^2 + \delta_{kg} b_k^2) \quad (5.88)$$

mit

$$K_j = \sum_{k=2}^{N-1} \langle \mathbf{j} | \hat{\sigma}_z^{(k-1)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)} | \mathbf{j} \rangle \quad (5.89)$$

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

Für $N = 2$ ist $K_j = 0$. Für $N \geq 3$ liegt K_j je nach Zustand $|\mathbf{j}\rangle$ zwischen $(N - 2)$ und $-(N - 2)$

$$K_j = \begin{cases} N - 2 & \text{für } |\mathbf{j}\rangle = |000 \dots 0\rangle, |111 \dots 1\rangle, |0101 \dots\rangle, \dots \\ N - 4 & \text{für } |\mathbf{j}\rangle = |100 \dots 0\rangle, \dots \\ \vdots & \\ -(N - 2) & \text{für } |\mathbf{j}\rangle = |001100 \dots\rangle, |110011 \dots\rangle, \dots \end{cases} \quad (5.90)$$

Damit lässt sich eine obere und untere Schranke für $\langle \mathbf{j} | \hat{S}^2 | \mathbf{j} \rangle$ angeben. Für eine starke J -Kopplung mit

$$\mathcal{H} = -\nu \sum_{k=1}^N \hat{\sigma}_z^{(k)} + J \sum_{k=1}^{N-1} (\hat{\sigma}_x^{(k)} \hat{\sigma}_x^{(k+1)} + \hat{\sigma}_y^{(k)} \hat{\sigma}_y^{(k+1)} + \hat{\sigma}_z^{(k)} \hat{\sigma}_z^{(k+1)}) \quad (5.91)$$

folgt

$$\langle \mathbf{j} | \hat{S}^2 | \mathbf{j} \rangle = -128 J^4 (N - 2 + K_j) - 256 \nu^2 J^2 (N - 1) \quad (5.92)$$

Wenn man einen lokalisierten Zustand betrachtet, bei dem nur Spin 1 angeregt ist, also $|\mathbf{j}\rangle = |100 \dots 0\rangle$, folgt $K_j = N - 4$ für $N \geq 3$ und damit

$$\langle \mathbf{j} | \hat{S}^2 | \mathbf{j} \rangle = \begin{cases} -256 J^2 \nu^2 & \text{für } N = 2 \\ -256 J^2 ((J^2 + \nu^2)(N - 1) - 2J^2) & \text{für } N \geq 3 \end{cases} \quad (5.93)$$

5.6. Effizienz für eine (m, n) -Pulsfolge

Wie bereits gesagt (Abschnitt 5.2.2), verläuft im Allgemeinen die tatsächliche Zeitentwicklung nicht exakt mit $\bar{\mathcal{H}}$, da die Korrekturterme $\bar{\mathcal{H}}^{(i)}$ in der Regel von Null verschieden sind. Wie aus (5.18) ersichtlich, hängen sie von der Zeit t_c ab, die ein gesamter Zyklus dauert. Für kleine t_c wird der Einfluss der Korrekturterme verringert, und das Entkoppeln wird genauer. Eine interessante Frage ist nun, ob man eine Verbesserung erzielen kann, indem man innerhalb einer festen Zeit t_c eine gegebene Pulsfolge mehrmals wiederholt, mit entsprechend höherer Pulsfrequenz. Im Folgenden soll dieser Frage nachgegangen werden.

Definition 5.5 (Puls-Hierarchie) Eine (m, n) -Pulsfolge ist die Pulsfolge, die man erhält, wenn man eine Pulsfolge mit m Zeitintervallen $\tau_k = \tau$ („Elementarpulsfolge“) innerhalb t_c n -mal wiederholt. Die Folge besteht dann aus mn Zeitintervallen der Länge $\tau = \frac{t_c}{mn}$.

Der Zustand nach Anwendung der Pulsfolge wird durch einen Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t_c)$ beschrieben. Als Maß für die Güte soll die Fidelity $F(n)$ nach der

5.6. Effizienz für eine (m,n) -Pulsfolge

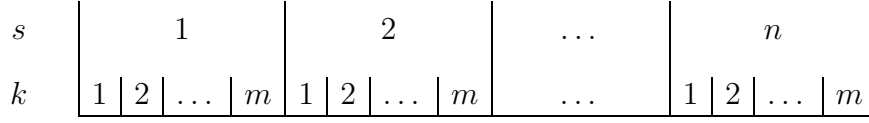


Abb. 5.1.: (m,n) -Pulsfolge

Zeit t_c betrachtet werden (siehe Definition 4.1). \hat{U} ergibt sich näherungsweise aus den Average Hamiltonians nullter und erster Ordnung (5.18)

$$\bar{\mathcal{H}} = \frac{1}{mn} \sum_{k=1}^{mn} \mathcal{H}_k \quad (5.94)$$

$$\bar{\mathcal{H}}^{(1)} = -\frac{it_c}{2m^2n^2} \sum_{j>k}^{mn} [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] \quad (5.95)$$

Wenn die zugrundeliegende Elementarfolge zu einem $\bar{\mathcal{H}} = 0$ führt, so ist offensichtlich, dass $\bar{\mathcal{H}}$ auch für die (m,n) -Folge verschwindet. Der Korrekturterm muss genauer betrachtet werden. Ob er mit wachsendem n betragsmäßig kleiner wird, hängt vom Verhalten der Summe über die Kommutatoren ab. Wenn diese Summe langsamer als mit n^2 anwächst, dann kann durch Erhöhung der Pulsfrequenz eine Verbesserung des Verfahrens erreicht werden.

Für die Rechnung wird eine Umindizierung vorgenommen. Anstatt die Intervalle und damit \mathcal{H}_k mit $k = 1, \dots, mn$ zu zählen, werden sie nun durch die beiden Indizes s und k beschrieben, also $\mathcal{H}_{s,k}$, wobei $s = 1, \dots, n$ den Unterzyklus beschreibt, und $k = 1, \dots, m$ das Intervall innerhalb eines Elementarzyklus (siehe auch Abb. 5.1). Da jeder Unterzyklus nur eine Wiederholung des ersten Zyklus ist, gilt dabei $\mathcal{H}_{s',k} = \mathcal{H}_{s,k} = \mathcal{H}_k$. Dann kann die Summe in (5.95) geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} \sum_{j>k}^{mn} [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] &= \sum_{s=s'}^n \sum_{j>k}^m [\mathcal{H}_{s,j}, \mathcal{H}_{s',k}] + \sum_{s>s'}^n \sum_{j,k}^m [\mathcal{H}_{s,j}, \mathcal{H}_{s',k}] \\ &= \sum_{s=s'}^n \sum_{j>k}^m [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] + \sum_{s>s'}^n \sum_{j,k}^m [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] \end{aligned} \quad (5.96)$$

Der zweite Summand in der obigen Formel verschwindet, da $\sum_{j,k}^m [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] = \sum_{j>k}^m [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] + [\mathcal{H}_k, \mathcal{H}_j] = 0$. Es folgt also

$$\sum_{j>k}^{mn} [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] = n \sum_{j>k}^m [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] = n \hat{S} \quad (5.97)$$

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

Also

$$\bar{\mathcal{H}}^{(1)} = -\frac{it_c}{2m^2n} \hat{S} \quad (5.98)$$

$$\text{wobei } \hat{S} = \sum_{j>k}^m [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] \quad (5.99)$$

Dabei ist \hat{S} eine Eigenschaft der Elementarfolge und somit unabhängig von n . Das heißt, dass tatsächlich der Einfluss der Korrektur niedrigster Ordnung durch eine Erhöhung von n verringert werden kann und damit auch die Fidelity vergrößert wird.

Im Folgenden soll die Fidelity noch näherungsweise angegeben werden und ein Beispiel betrachtet werden. Dazu wird der Zeitentwicklungsoperator genähert durch $\hat{U}(t_c) \approx e^{-it_c(\bar{\mathcal{H}}+\bar{\mathcal{H}}^{(1)})}$. In dem hier betrachteten Fall bewirkt die Folge eine Entkopplung, d. h. $\bar{\mathcal{H}} = 0$. Für die Zeitentwicklung gilt dann

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_c) &\approx e^{-it_c\bar{\mathcal{H}}^{(1)}} \\ &\approx \hat{1} - it_c\bar{\mathcal{H}}^{(1)} - \frac{t_c^2}{2}(\bar{\mathcal{H}}^{(1)})^2 \\ &\approx \hat{1} - \frac{t_c^2}{2m^2n} \hat{S} + \frac{t_c^4}{8m^4n^2} \hat{S}^2 \end{aligned} \quad (5.100)$$

Das gilt natürlich nur, wenn \hat{S} nicht verschwindet, was z. B. bei symmetrischen Folgen der Fall ist. Dann müssen höhere Terme wie $\bar{\mathcal{H}}^{(2)}$, etc. berücksichtigt werden. Dieser Fall soll aber hier nicht betrachtet werden. Für die Diagonalmatrixelemente von \hat{U} erhält man dann

$$\langle i | \hat{U}(t_c) | i \rangle \approx 1 - \frac{t_c^2}{2m^2n} \langle i | \hat{S} | i \rangle + \frac{t_c^4}{8m^4n^2} \langle i | \hat{S}^2 | i \rangle \quad (5.101)$$

Daraus berechnet sich dann die Fidelity $F(t_c)$.

5.6.1. Beispiel: DNS

Als Beispiel soll die DNS betrachtet werden, es gilt dann $m = 4$. Der Operator \hat{S} wurde schon in Abschnitt 5.5 berechnet. Für starke J -Kopplung und den Anfangszustand $|i\rangle = |100\dots 0\rangle$ erhält man (5.93):

$$\begin{aligned} \langle i | \hat{S} | i \rangle &= 0 \\ \langle i | \hat{S}^2 | i \rangle &= \begin{cases} -256 J^2 \nu^2 & \text{für } N = 2 \\ -256 J^2 ((J^2 + \nu^2)(N - 1) - 2J^2) & \text{für } N \geq 3 \end{cases} \end{aligned}$$

und damit mit $m = 4$ für $N = 2$

$$\langle i | \hat{U}(t_c) | i \rangle \approx 1 - \frac{J^2 \nu^2 t_c^4}{8n^2} \quad (5.102)$$

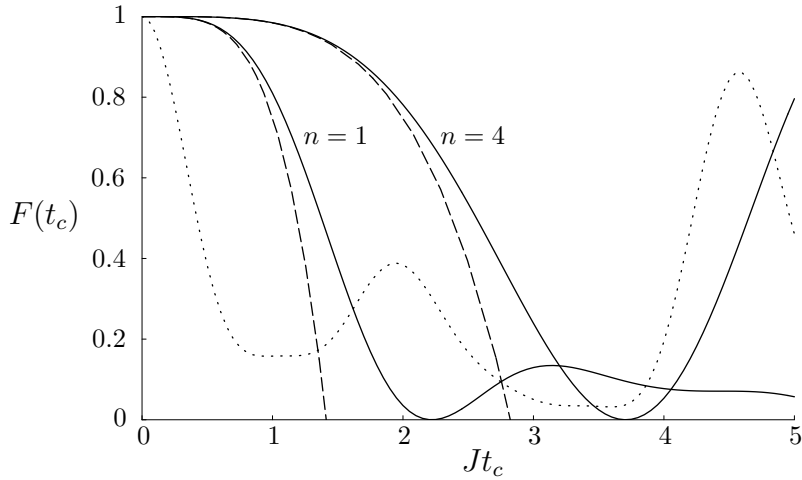


Abb. 5.2.: Entkopplung mit DNS für 4 Spins, $\nu = 0$. Die Kurven entsprechen der freien Entwicklung (\cdots), Entkopplung mit einem Zyklus (—) und der Näherung $F = 1 - (Jt)^4/4$ (---), Entkopplung mit 4 Zyklen (—) und der Näherung $F = 1 - (Jt)^4/64$ (---).

$$F(t_c) \approx 1 - \frac{J^2 \nu^2 t_c^4}{4n^2} \quad (5.103)$$

und für $N \geq 3$

$$F(t_c) \approx 1 - \frac{J^2 t_c^4}{4n^2} ((J^2 + \nu^2)(N - 1) - 2J^2) \quad (5.104)$$

$$\text{bzw.} \quad F(t_c) \approx 1 - \frac{J^4 t_c^4}{4n^2} (N - 3) \quad \text{für } \nu = 0 \quad (5.105)$$

Das Verhalten von F für 4 Spins ist in Abbildung 5.2 gezeigt. Zwei Punkte sind bemerkenswert:

- F verbessert sich mit zunehmender Pulsfrequenz. Das Entkoppeln kann somit verbessert werden durch eine Folge mit größerem n . Um ein bestimmtes F zu erreichen, muss bei doppelt so langer Zeit n viermal so groß sein, d. h. die Pulsfrequenz muss doppelt so hoch sein.
- F nimmt ab mit wachsender Spinzahl N . Das Entkoppeln wird also immer schlechter, wenn das System größer wird. Die Abnahme ist dabei allerdings nur linear in N und nicht exponentiell.

5.7. Zusammenfassung

Für die Funktionsweise eines Quantencomputers ist es wichtig, dass die Dynamik des zugrundeliegenden physikalischen Systems sehr genau kontrolliert wer-

5. Entkopplung von wechselwirkenden Qubits

den kann. Am Beispiel des NMR-Quantencomputers konnte gezeigt werden, dass ein hoher Grad an Kontrolle möglich ist. Mit Methoden der gepulsten Kernspinresonanz ist es möglich, bei einem Spinsystem mit gegebenen Wechselwirkungen zwischen den Spins eine große Anzahl von verschiedenen effektiven Hamiltonoperatoren zu erzwingen. Insbesondere ist es möglich, sämtliche Kopplungen „auszuschalten“.

Für die Skalierbarkeit des Systems ist es von Bedeutung, ob für die verwendeten Methoden spin-selektive Operationen angewandt werden müssen. Selektive Pulse setzen dabei voraus, dass jeder Spin des Systems einzeln adressierbar ist. Diese Bedingung kann zu einer deutlichen Einschränkung der Systemgröße führen, da nur eine geringe Anzahl an NMR-geeigneten Kernen vorhanden ist und daher auch nur ein geringes Spektrum an möglichen Rabi-Frequenzen.

Eine allgemeine Behandlung des Entkopplungs-Problems führt zu einem Kriterium dafür, welche Wechselwirkungen im Rahmen der hier diskutierten Methoden mit globalen Pulsen entkoppelt werden können. Dabei zeigt es sich, dass die am häufigsten diskutierte J -Kopplung selektive Pulse erforderlich macht.

Das hat außer dem Adressierungsproblem auch zur Folge, dass der benötigte Aufwand an Zeit und Anzahl der erforderlichen Pulse mit der Systemgröße zunimmt. Es hat sich gezeigt, dass die bereits bekannten effizienten Methoden für schwache J -Kopplung auf beliebige Wechselwirkungen verallgemeinert werden können. Insbesondere existiert eine Methode für diagonale Kopplungen, wie z. B. starke J -Kopplung, die genau so effizient ist wie das effizienteste bekannte Schema für schwache J -Kopplung.

Im Gegensatz zum Fall der schwachen J -Kopplung führen die Methoden bei allgemeinen Wechselwirkungen in der Regel nur zu einer näherungsweisen Entkopplung. Diese Näherung wird dabei schlechter für größere Systeme. Für den idealisierten Fall unendlich schneller, kontinuierlicher Pulse kann ein exaktes Entkoppeln realisiert werden. Wie im nächsten Kapitel gezeigt wird, gilt dies jedoch nicht mehr für den physikalisch realistischen Fall, dass die Kontrollpulse nicht ideal exakt ausgeführt werden können.

Aus diesen Überlegungen ergibt sich der Schluss, dass für das betrachtete System ein hohes Maß an Kontrolle möglich ist. Dennoch spielt die Problematik der Skalierbarkeit auf große Systeme eine wichtige Rolle.

6. Entkopplung unter externen Kontrollfehlern

6.1. Einleitung

In Kapitel 5 wurde das Entkoppeln von Wechselwirkungen unter idealen Bedingungen in Form von genauen Pulsen betrachtet. Selbst unter dieser Annahme führt eine Pulsfolge im Allgemeinen nicht zu einer Zeitentwicklung, die genau dem Average Hamiltonian entspricht, da die Korrekturterme höherer Ordnung in der Regel von Null verschieden sind. Wie in Abschnitt 5.6 gezeigt wurde, kann durch Erhöhung der Pulsfrequenz der Einfluss der Korrekturterme verringert und damit das Entkopplungsverfahren verbessert werden.

Die Frage ist nun, was passiert, wenn die Pulse nicht mehr genau, sondern mit Fehlern behaftet sind, so dass es zu zufälligen Über- und Unter-Drehungen kommt. Die fehlerhaften Pulse werden zu einer Verschlechterung des Verfahrens führen, und man vermutet, dass bei einer Erhöhung der Anzahl an Pulsen auch die Verschlechterung zunehmen wird.

Man hat in diesem Fall also zwei gegenläufige Effekte, und die Frage ist nun, ob einer der beiden Effekte überwiegt, so dass insgesamt eine Verschlechterung oder Verbesserung eintritt, oder ob sich beide Effekte gegenseitig kompensieren, so dass eine Erhöhung der Pulsfrequenz keine Auswirkung hat.

Im Folgenden soll die Frage beispielhaft an einem Zwei-Spin-System geklärt werden. Zur Entkopplung wird die DNS aus Abschnitt 5.5 verwendet. Es werden zwei Fälle für die Wechselwirkung zwischen den Spins betrachtet, schwache und starke J -Kopplung.

6.2. Fehlerhaftes Entkoppeln für schwache J -Kopplung

Zunächst soll der Fall einer schwachen J -Kopplung zwischen zwei Spins betrachtet werden. Der Hamiltonoperator hat die Form

$$\mathcal{H} = -\nu_1 \hat{\sigma}_z^{(1)} - \nu_2 \hat{\sigma}_z^{(2)} + J \hat{\sigma}_z^{(1)} \hat{\sigma}_z^{(2)} \quad (6.1)$$

6. Entkopplung unter externen Kontrollfehlern

Zur Entkopplung wird die DNS verwendet. Wie schon gesagt, ist für den Fall der schwachen Kopplung das Verfahren exakt, da alle transformierten Hamiltonians kommutieren und somit alle Korrekturterme verschwinden. Eine Erhöhung der Pulsfrequenz kann also keine Verbesserung bringen, bei ungenauen Pulsen folgt vielmehr eine Verschlechterung. Dieser Abschnitt dient daher mehr als Vorbe-trachtung für den Fall starker Kopplung.

Die Pulse um die x -Achse sollen ungenau sein, d. h. weichen um einen Winkel δ von einem π -Puls ab. Dabei ist δ bei jedem Puls zufällig mit der Verteilung $w(\delta, \sigma)$ gewählt. Der Einfachheit halber werden die y -Pulse als genau angenommen. Also

$$\hat{X}^{(i)}(\delta) = i\hat{\sigma}_x^{(i)} \cos \frac{\delta}{2} - \hat{1} \sin \frac{\delta}{2} \quad (6.2)$$

$$\hat{Y}^{(i)} = i\hat{\sigma}_y^{(i)} \quad (6.3)$$

$$w(\delta, \sigma) = (\sqrt{2\pi}\sigma)^{-1} e^{-\frac{\delta^2}{2\sigma^2}} \quad (6.4)$$

Es wird also folgende Pulsfolge verwendet

$$(\hat{Y}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(1)}(\delta'), \tau, \hat{Y}^{(2)}, \tau, \hat{X}^{(1)}(\delta), \tau)$$

Den Zustand des Systems nach der Zeit $t_c = 4\tau$, also nachdem genau ein Entkopplungszyklus durchgeführt wurde, erhält man durch den Operator \hat{R}

$$|\psi'\rangle = \hat{R}|\psi\rangle \quad (6.5)$$

$$\hat{R}(\delta, \delta') = \hat{Y}^{(2)}\hat{\tau}\hat{X}^{(1)}(\delta')\hat{\tau}\hat{Y}^{(2)}\hat{\tau}\hat{X}^{(1)}(\delta)\hat{\tau} \quad (6.6)$$

$$\text{mit } \hat{\tau} = e^{-i\mathcal{H}\tau} \quad (6.7)$$

Die Matrixdarstellung von \hat{R} in der Produktbasis hat die Form

$$R(\delta, \delta') = \begin{pmatrix} a & 0 & \kappa b & 0 \\ 0 & a & 0 & -\kappa^* b \\ -\kappa^* b^* & 0 & a^* & 0 \\ 0 & \kappa b^* & 0 & a^* \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

mit den Parametern

$$a(\delta, \delta') = \cos \frac{\delta}{2} \cos \frac{\delta'}{2} - e^{-2ik} \sin \frac{\delta}{2} \sin \frac{\delta'}{2} \quad (6.9)$$

$$b(\delta, \delta') = e^{ik} \cos \frac{\delta'}{2} \sin \frac{\delta}{2} + e^{-ik} \cos \frac{\delta}{2} \sin \frac{\delta'}{2} \quad (6.10)$$

$$k = 2\nu_1 t \quad (6.11)$$

$$\kappa = i e^{2iJt} \quad (6.12)$$

Für die Rechnung wird die Forminvarianz von R bei wiederholter Anwendung ausgenutzt. Es gilt nämlich für zwei Transformationen R mit verschiedenen Parametern a und b

$$R(a_2, b_2)R(a_1, b_1) = R(a, b) \quad (6.13)$$

6.2. Fehlerhaftes Entkoppeln für schwache J -Kopplung

mit

$$a = a_1 a_2 - b_1^* b_2 \quad (6.14)$$

$$b = b_1 a_2 + a_1^* b_2 \quad (6.15)$$

Bei wiederholter Anwendung bleibt somit die Form (6.8) erhalten, mit einer einfachen Rekursionsformel für die Parameter. Nach n Zyklen hat man also

$$\begin{aligned} R_n &= R(\delta_n, \delta'_n) R_{n-1} \\ &= \prod_{i=1}^n R(\delta_i, \delta'_i) \end{aligned} \quad (6.16)$$

Dabei ist das Produkt sortiert mit nach links zunehmendem i . R_n ist von der Form (6.8) mit den Parametern

$$a_n = a_n(\delta_1, \dots, \delta_n, \delta'_1, \dots, \delta'_n) \quad (6.17)$$

$$b_n = b_n(\delta_1, \dots, \delta_n, \delta'_1, \dots, \delta'_n) \quad (6.18)$$

die sich aus folgender Rekursionsformel ergeben

$$a_{n+1} = a_n a(\delta_{n+1}, \delta'_{n+1}) - b_n^* b(\delta_{n+1}, \delta'_{n+1}) \quad (6.19)$$

$$b_{n+1} = b_n a(\delta_{n+1}, \delta'_{n+1}) + a_n^* b(\delta_{n+1}, \delta'_{n+1}) \quad (6.20)$$

Als Maß für die Güte der Entkopplung ist nun die Fidelity F eines präparierten Zustandes gesucht. Für eine Realisierung des Entkopplungsverfahrens mit einem bestimmten Satz von zufällig gewählten Fehlerwinkeln $\{\delta_1, \dots, \delta_n, \delta'_1, \dots, \delta'_n\}$ ist $F(n) = \left| \langle \psi | \hat{R}_n | \psi \rangle \right|^2$. Für den Ensemblemittelwert über alle möglichen Fehler gilt

$$F(n) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \langle \psi | \hat{R}_n | \psi \rangle \right|^2 w_n d_n \quad (6.21)$$

$$\text{mit } w_n = \prod_{i=1}^n w(\delta_i, \sigma_i) w(\delta'_i, \sigma'_i) \quad d_n = \prod_{i=1}^n d\delta_i d\delta'_i \quad (6.22)$$

Hier soll beispielhaft der Fall betrachtet werden, dass der anfangs präparierte Zustand einer der Basiszustände ist. Man erhält dann

$$F(n) = \int a_n^* a_n w_n d_n \quad (6.23)$$

Behauptung (der Beweis erfolgt durch vollständige Induktion):

$$\int a_n^* a_n w_n d_n = \frac{1}{2} (1 + e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 + \sigma_i'^2}) \quad (6.24)$$

$$\int b_n^* b_n w_n d_n = \frac{1}{2} (1 - e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 + \sigma_i'^2}) \quad (6.25)$$

6. Entkopplung unter externen Kontrollfehlern

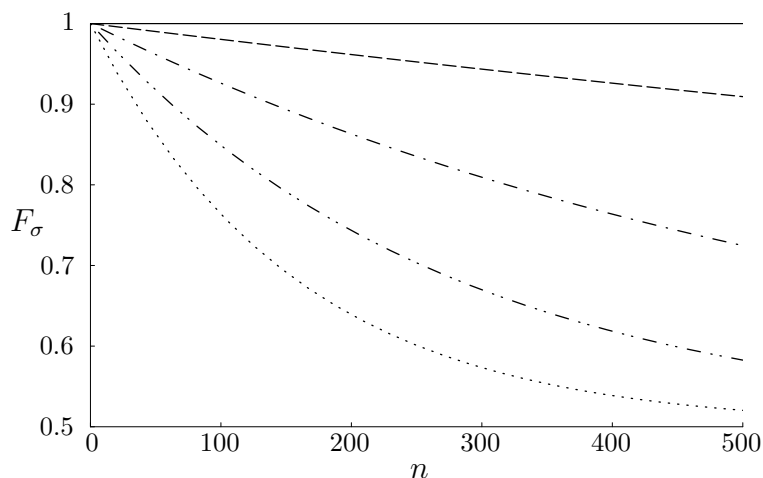


Abb. 6.1.: Entkopplung für fehlerhafte Pulse bei schwacher J -Kopplung. Die Kurven entsprechen $\sigma = 0$ (—), 0.02 (---), 0.04 (-·-), 0.06 (-·-·-), 0.08 (····)

Hier wird natürlich davon ausgegangen, dass die Ungenauigkeiten bei jedem Puls gleich geartet sind und damit $\sigma_i = \sigma'_i = \sigma$. Für $F(n)$ erhält man dann

$$F_\sigma(n) = \frac{1}{2}(1 + e^{-n\sigma^2}) \quad (6.26)$$

In Abbildung 6.1 ist $F(n)$ für verschiedene σ dargestellt. Für ideale Pulse, d. h. $\sigma = 0$, erhält man perfekte Entkopplung. Für endliche σ , d. h. fehlerhafte Pulse, nimmt F mit der Zahl der Zyklen ab und geht schließlich gegen $1/2$. Dabei nimmt F umso schneller ab, je größer σ ist.

6.3. Fehlerhaftes Entkoppeln für starke J -Kopplung

Der Fall der starken J -Kopplung soll nun numerisch betrachtet werden. Für ein Zwei-Spin-System mit dem Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = -\nu(\hat{\sigma}_z^{(1)} + \hat{\sigma}_z^{(2)}) + J(\hat{\sigma}_x^{(1)}\hat{\sigma}_x^{(2)} + \hat{\sigma}_y^{(1)}\hat{\sigma}_y^{(2)} + \hat{\sigma}_z^{(1)}\hat{\sigma}_z^{(2)}) \quad (6.27)$$

wurde F numerisch berechnet für verschiedene σ und für verschiedene Anzahl von Zyklen innerhalb der Beobachtungszeit t_c . Die Fehler δ wurden mittels Zufallsgenerator gewählt und F als Mittel über 1000 Realisierungen berechnet. Abbildung 6.2 zeigt $F_\sigma(n)$ zur Zeit $t_c = 1/J$ für verschiedene σ . Der Anfangszustand ist dabei $|01\rangle$, und der Wechselwirkungsparameter ist $J = 10\nu$.

6.3. Fehlerhaftes Entkoppeln für starke J -Kopplung

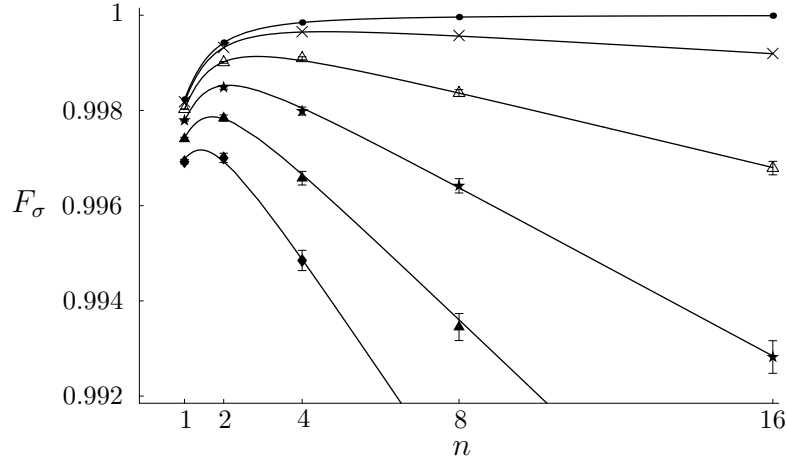


Abb. 6.2.: Entkopplung für fehlerhafte Pulse bei starker J -Kopplung. — Zur Zeit $t_c = 1/J$, Mittel über 1000 Realisierungen. Die Kurven entsprechen $\sigma = 0$ (●), 0.01 (×), 0.02 (△), 0.03 (★), 0.04 (▲), 0.05 (◆). Die Näherungsfunktion ist $F_\sigma(n) = \frac{1}{2}(1 + e^{-n\sigma^2})(1 - \frac{1}{400n^2} + \frac{1}{1369n^4})$; der Korrelationskoeffizient für $\sigma = 0$ beträgt 0.999996.

Das Verhalten für $\sigma = 0$ lässt sich recht gut beschreiben mit (5.103):

$$F_0(n) \approx 1 - \frac{J^2(\nu_1 + \nu_2)^2 t_c^4}{16n^2} = 1 - \frac{1}{400n^2} \quad (6.28)$$

mit einem Korrelationskoeffizienten von 0.997. Es zeigt sich nun, dass sich die erhaltenen Werte für fehlerhafte Entkopplung sehr gut beschreiben lassen durch das Ergebnis für schwache Kopplung. Dabei wirkt die Funktion (6.26) wie eine zusätzliche „Dämpfung“ zum idealen Verhalten für $\sigma = 0$. Das Verhalten lässt sich also beschreiben durch

$$\begin{aligned} F_\sigma(n) &= \frac{1}{2}(1 + e^{-n\sigma^2})F_0(n) \\ F_\sigma(n) &\approx \frac{1}{2}(1 + e^{-n\sigma^2})(1 - \frac{a}{n^2}) \end{aligned} \quad (6.29)$$

Tatsächlich zeigen sich also bei einer Erhöhung von n beide oben genannten Effekte, eine Verbesserung durch Unterdrückung der Korrekturterme und eine Verschlechterung durch die zunehmende Zahl fehlerhafter Pulse. Dabei überwiegt bei kleinen n die Verbesserung. Für große n führen die fehlerhaften Pulse dazu, dass die Fidelity schließlich gegen $1/2$ geht. Außer für $\sigma = 0$, wo F für große n gegen $F = 1$ geht, gibt es für jedes σ eine maximale Fidelity F_{max} , die bei einer idealen Anzahl n_{ideal} von Zyklen erreicht werden kann. Zwei Punkte sind zu beachten

6. Entkopplung unter externen Kontrollfehlern

- Mit steigendem σ verlagert sich n_{ideal} zu immer kleineren Werten, so dass schließlich die maximale Fidelity bei einem einzigen Zyklus erreicht wird und jede Erhöhung der Zyklenzahl zu einer Verschlechterung führt.
- $F = 1$ kann nur für ideale Pulse erreicht werden und dann nur für unendlich hohe Pulsfrequenz. Für steigendes σ sinkt F_{max} .

Für kleine σ ergibt sich dabei aus (6.29)

$$n_{ideal} \approx \left(\frac{4a}{\sigma^2}\right)^{1/3} \quad (6.30)$$

$$F_{max} \approx 1 - \frac{3}{2} \left(\frac{a\sigma^4}{2}\right)^{1/3} \quad (6.31)$$

Das heißt also, dass bei fehlerhaften Pulsen trotz Erhöhung der Pulsfrequenz keine beliebig genaue Entkopplung erreicht werden kann. Vielmehr kann nur eine maximale Fidelity erreicht werden, die polynomial mit dem Fehler σ abnimmt. Dieser Maximalwert wird erreicht für eine bestimmte ideale Pulsfrequenz, die ebenfalls mit σ abnimmt. Wenn die Pulsfrequenz über diesen Idealwert hinaus gesteigert wird, so führt das wegen des stärkeren Einflusses der Pulsungenauigkeiten zum Gegenteil des beabsichtigten Effekts, und die Fidelity nimmt wieder ab.

6.4. Quantensimulation

Die Überlegungen aus Kapitel 5 und den bisherigen Abschnitten dieses Kapitels gelten nicht nur für den recht speziellen Fall der Entkopplung von Wechselwirkungen. Sie lassen sich in gewissem Umfang auch auf andere Bereiche verallgemeinern. So wurden zur Realisierung eines universellen Quantensimulators ganz ähnliche Methoden vorgeschlagen [44].

Das Entkopplungsproblem lässt sich im Prinzip deuten als ein Spezialfall einer Quantensimulation, bei der ein System simuliert werden soll, das „nichts tut“. Es handelt sich also um die Simulation eines nicht-wechselwirkenden Spinsystems durch ein wechselwirkendes. Daher können die Resultate bezüglich der Skalierbarkeit und des Einflusses fehlerhafter Kontrolloperationen auch auf die Quantensimulation übertragen werden.

6.5. Zusammenfassung

In Abschnitt 5.6 wurde gezeigt, dass für den idealisierten Fall unendlich schneller, kontinuierlicher Pulse ein exaktes Entkoppeln von wechselwirkenden Qubits realisiert werden kann. Wie in diesem Kapitel für ein spezielles System nachgewiesen

6.5. Zusammenfassung

wurde, gilt dies jedoch nicht mehr für den physikalisch realistischen Fall, dass die Kontrollpulse nicht ideal exakt ausgeführt werden können, sondern zufälligen Fehlern unterworfen sind. Dann führen die Kontrolloperationen neue Störungen ein, die eine perfekte Kontrolle über das System unmöglich machen.

7. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden vor allem zwei Aspekte der Kontrollproblematik eines quanteninformationsverarbeitenden Systems betrachtet, Kontrollmangel bei der Ausführung von Quantenalgorithmen und bei der externen Kompensation störender interner Wechselwirkungen. Diese beiden Konzepte wurden vor allem unter dem Gesichtspunkt der Skalierbarkeit auf größere Systeme untersucht. Andere Effekte, insbesondere die Dekohärenz, wurden hier ausgeklammert.

Zufällige, fehlerbehaftete Operationen, die während eines Algorithmus auf ein Quantensystem angewendet werden, führen dazu, dass die Entropie des Systems anwächst. Damit wird die Arbeitsweise des Algorithmus beeinträchtigt. Speziell beim Such-Algorithmus von Grover hat sich ergeben, dass Fehler in bestimmten Teilschritten zu einem Zusammenbruch des Algorithmus führen können. Dabei nimmt die Größe der tolerierbaren Fehler exponentiell mit der Register-Größe (Anzahl Qubits) ab. Das bedeutet, dass für eine gegebene experimentelle Realisierung mit bestimmten Fehlern die Größe der behandelbaren Probleme nach oben beschränkt ist.

Ein anderes Problem stellen interne Wechselwirkungen in einem Quantenregister dar. Kopplungen zwischen den Qubits können dazu führen, dass gespeicherte Zustände schnell verloren gehen. Allerdings ist dabei, wie hier gezeigt wurde, die Delokalisierungszeit praktisch unabhängig von der Größe des Registers.

In Quantencomputern, die auf NMR-Techniken beruhen, können die verschiedenen Qubits durch externe Pulsfolgen entkoppelt werden. In der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, dass für die üblicherweise diskutierten Wechselwirkungen wie z. B. J -Kopplung spin-selektive Operationen notwendig sind. Das führt aus zwei Gründen zu Skalierungsproblemen: einerseits, weil die Qubits einzeln adressierbar sein müssen, und andererseits, weil der Aufwand an Zeit und Kontrolloperationen mit der Systemgröße zunimmt. Es hat sich aber erwiesen, dass zusätzlich zu den bekannten Methoden für schwache J -Kopplung auch für allgemeine Wechselwirkungen effiziente Schemata existieren, bei denen der Aufwand nur polynomial mit der Systemgröße skaliert.

Die Pulsfolgen führen im Allgemeinen allerdings nicht zu einer perfekten Entkopplung. Die Abweichungen nehmen dabei ebenfalls mit der Anzahl an Qubits zu. Das kann durch eine stärkere Kontrolle des Systems in Form von höheren Pulsfrequenzen ausgeglichen werden. Hier gilt allerdings ebenfalls, dass durch einen Kontrollmangel bei den Entkopplungsoperationen, der in einem realen Sys-

tem nicht zu vermeiden ist, die Wirksamkeit beeinträchtigt wird. Für hohe Pulsfrequenzen überwiegt dann der Nachteil durch die von den Kontrolloperationen zusätzlich eingeführten Fehler.

Es konnte folglich erwiesen werden, dass Kontrollmangel in Form von fehlerhaften Kontrolloperationen für die Skalierbarkeit des Quantencomputers eine nicht zu vernachlässigende Einschränkung darstellt. Für weitere Untersuchungen stellt sich die Frage, ob derartige Fehler durch Korrekturverfahren unterdrückt werden können. Das erscheint im Allgemeinen unmöglich. Für bestimmte Algorithmen, bei denen eindeutig eine Nutz- von einer Fehlerdynamik unterschieden werden kann, sind geeignete Verfahren jedoch denkbar.

A. Hausdorff-Formel für rekursive Kommutatoren

Die Hausdorff-Formel lautet

$$e^{-i\delta\hat{A}}\hat{Q}e^{i\delta\hat{A}} = \hat{Q} - i\delta [\hat{A}, \hat{Q}] + \frac{(i\delta)^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{Q}]] - \frac{(i\delta)^3}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{Q}]]] + \dots$$

Für endliche Systeme wie z. B. Spins zeigen mehrfache Kommutatoren typischerweise rekursives Verhalten, und obige Formel kann vereinfacht werden. Im Folgenden sollen zwei nützliche Fälle angegeben werden.

Für $[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{Q}]]] = q [\hat{A}, \hat{Q}]$ folgt

$$e^{-i\delta\hat{A}}\hat{Q}e^{i\delta\hat{A}} = \hat{Q} - \frac{i}{\sqrt{q}} \sin(\sqrt{q}\delta) [\hat{A}, \hat{Q}] + \frac{1}{q}(\cos(\sqrt{q}\delta) - 1) [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{Q}]] \quad (\text{A.1})$$

Für $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{Q}]] = q\hat{Q} + p\hat{A}$ gilt (A.1) und es folgt

$$e^{-i\delta\hat{A}}\hat{Q}e^{i\delta\hat{A}} = \cos(\sqrt{q}\delta)\hat{Q} - \frac{i}{\sqrt{q}} \sin(\sqrt{q}\delta) [\hat{A}, \hat{Q}] + \frac{p}{q}(\cos(\sqrt{q}\delta) - 1)\hat{A} \quad (\text{A.2})$$

B. Eigenwerte einer Spinkette

Betrachte dazu die Summe

$$\sum_{i=1}^N \left(e^{i\frac{2\pi k}{N}} \right)^i \equiv \sum_{i=1}^N q^i \quad (\text{B.6})$$

Wegen

$$q \sum_{i=1}^N q^i = \sum_{i=2}^{N+1} q^i = \sum_{i=1}^N q^i \quad \text{da } q^{N+1} = q \quad (\text{B.7})$$

folgt

$$(1 - q) \sum_{i=1}^N q^i = 0 \quad (\text{B.8})$$

und damit

$$\sum_{i=1}^N \left(e^{i\frac{2\pi k}{N}} \right)^i = \begin{cases} N & \text{für } k = 0 \\ 0 & \text{für } k = 1, \dots, N - 1 \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

Für die Normierung der Eigenvektoren erhält man also

$$\mathbf{x}_k^2 = \begin{cases} N & \text{für } k = 0 \\ \frac{N}{2} & \text{für } k = 1, \dots, N - 1 \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

und damit

$$\lambda_k = 2 \cos \frac{k\pi}{N} \quad \text{für } k = 0, 1, \dots, N - 1 \quad (\text{B.11})$$

$$\mathbf{x}_k = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N}} (1, 1, \dots, 1) & \text{für } k = 0 \\ \sqrt{\frac{2}{N}} \left(\cos \frac{k\pi}{2N}, \cos \frac{3k\pi}{2N}, \dots, \cos \frac{(2N-1)k\pi}{2N} \right) & \text{für } k = 1, \dots, N - 1 \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

C. Bessel-Funktionen

Hier folgen einige Eigenschaften der in Kapitel 4 verwendeten Bessel-Funktionen (siehe [12]).

$$J_n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(n+k+1)} \left(\frac{t}{2}\right)^{n+2k} \quad (\text{C.1})$$

$$J_0(t) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{\cos xt}{\sqrt{1-x^2}} \quad (\text{C.2})$$

$$J_1(t) = \frac{t}{\pi} \int_{-1}^1 dx \sqrt{1-x^2} \cos xt \quad (\text{C.3})$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{x \sin xt}{\sqrt{1-x^2}} \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{2n}{t} J_n(t) = J_{n-1}(t) + J_{n+1}(t) \quad (\text{C.5})$$

$$\frac{d}{dt} J_0(t) = -J_1(t) \quad (\text{C.6})$$

$$\frac{d}{dt} J_n(t) = \frac{1}{2} (J_{n-1}(t) - J_{n+1}(t)) \quad \text{für } n \geq 1 \quad (\text{C.7})$$

$$\frac{d}{dt} (J_0^2(t) + J_1^2(t)) = -\frac{2}{t} J_1^2(t) \quad (\text{C.8})$$

für $t \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} J_0(t) &\approx 1 - \frac{t^2}{4} \\ J_1(t) &\approx \frac{t}{2} - \frac{t^3}{16} \\ J_0^2(t) + J_1^2(t) &\approx 1 - \frac{t^2}{4} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

C. Bessel-Funktionen

für $t \rightarrow \infty$:

$$J_n(t) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi t}} \cos\left(t - \frac{\pi n}{2} - \frac{\pi}{4}\right)$$
$$J_0(t) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi t}} \cos\left(t - \frac{\pi}{4}\right) \tag{C.10}$$

$$J_1(t) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi t}} \sin\left(t - \frac{\pi}{4}\right) \tag{C.11}$$

Literaturverzeichnis

- [1] J. I. Cirac und P. Zoller, Quantum Computations with Cold Trapped Ions, *Phys. Rev. Lett.* **74**(20), 4091–4094 (1995). 1, 17
- [2] H.-J. Briegel, T. Calarco, D. Jaksch, J. I. Cirac und P. Zoller, Quantum computing with neutral atoms, *J. Mod. Opt.* **47**(2/3), 415–451 (2000). 1
- [3] D. G. Cory, M. D. Price und T. F. Havel, Nuclear magnetic resonance spectroscopy: An experimentally accessible paradigm for quantum computing, *Physica D* **120**, 82–101 (1998). 1
- [4] N. A. Gershenfeld und I. L. Chuang, Bulk Spin-Resonance Quantum Computation, *Science* **275**, 350–356 (1997). 1
- [5] D. Loss und D. P. DiVincenzo, Quantum computation with quantum dots, *Phys. Rev. A* **57**(1), 120–126 (1998). 1
- [6] A. Shnirman, G. Schön und Z. Hermon, Quantum Manipulations of Small Josephson Junctions, *Phys. Rev. Lett.* **79**(12), 2371–2374 (1997). 1
- [7] P. W. Shor, Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory, *Phys. Rev. A* **52**(4), 2493–2496 (1995). 2
- [8] A. M. Steane, Error Correcting Codes in Quantum Theory, *Phys. Rev. Lett.* **77**(5), 793–797 (1996). 2
- [9] L.-M. Duan und G.-C. Guo, Reducing decoherence in quantum-computer memory with all quantum bits coupling to the same environment, *Phys. Rev. A* **57**(2), 737–741 (1998). 2
- [10] P. Zanardi und M. Rasetti, Noiseless Quantum Codes, *Phys. Rev. Lett.* **79**(17), 3306–3309 (1997). 2
- [11] L. Viola und S. Lloyd, Dynamical suppression of decoherence in two-state quantum systems, *Phys. Rev. A* **58**(4), 2733–2744 (1998). 2, 44
- [12] I. N. Bronstein und K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Teubner, Stuttgart, 1991. 5, 19, 87

- [13] P. W. Shor, Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer, *SIAM J. Comput.* **26**(5), 1484–1509 (1994), LANL e-print quant-ph/9508027 v2. [16](#)
- [14] L. K. Grover, Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack, *Phys. Rev. Lett.* **79**(2), 325–328 (1997). [16](#)
- [15] M. Boyer, G. Brassard, P. Høyer und A. Tapp, Tight Bounds on Quantum Searching, *Fortschr. Phys.* **46**(4–5), 493–505 (1998), older version: LANL e-print quant-ph/9605034. [16](#), [17](#), [20](#)
- [16] G. Brassard, Searching a Quantum Phone Book, *Science* **275**, 627–628 (1997). [17](#)
- [17] L. K. Grover, Quantum Computers Can Search Rapidly by Using Almost Any Transformation, *Phys. Rev. Lett.* **80**(19), 4329–4332 (1998). [17](#)
- [18] G. Chen, S. A. Fulling und M. O. Scully, Grover’s Algorithm for Multiobject Search in Quantum Computing, LANL e-print quant-ph/9909040 (1999). [17](#)
- [19] E. Biham, O. Biham, D. Biron, M. Grassl und D. A. Lidar, Grover’s quantum search algorithm for an arbitrary initial amplitude distribution, *Phys. Rev. A* **60**(4), 2742–2745 (1999). [17](#)
- [20] L. K. Grover, Rapid sampling through quantum computing, LANL e-print quant-ph/9912001 v2 (2000). [17](#)
- [21] I. L. Chuang, N. Gershenfeld und M. Kubinec, Experimental Implementation of Fast Quantum Searching, *Phys. Rev. Lett.* **80**(15), 3408–3411 (1998). [17](#)
- [22] J. A. Jones, M. Mosca und R. H. Hansen, Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer, *Nature* **393**, 344–346 (1998). [17](#)
- [23] P. G. Kwiat, J. R. Mitchell, P. D. D. Schwindt und A. G. White, Grover’s search algorithm: An optical approach, LANL e-print quant-ph/9905086 (1999). [17](#)
- [24] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, M. H. Sherwood, C. S. Yannoni, G. Breyta und I. L. Chuang, First implementation of a three quantum bit search algorithm, LANL e-print quant-ph/9910075 (1999). [17](#)
- [25] G. L. Long, Y. S. Li, W. L. Zhang und L. Niu, Phase matching in quantum searching, *Phys. Lett. A* **262**, 27–34 (1999), older version: LANL e-print quant-ph/9906020. [17](#)
- [26] C. Miquel, J. P. Paz und W. H. Zurek, Quantum Computation with Phase Drift Errors, *Phys. Rev. Lett.* **78**(20), 3971–3974 (1997). [17](#)

- [27] G. L. Long, W. L. Zhang, Y. S. Li und L. Niu, Arbitrary Phase Rotation of the Marked State Can not Be Used for Grover's Quantum Search Algorithm, LANL e-print quant-ph/9904077 (1999). 24
- [28] G. L. Long, Y. S. Li, W. L. Zhang und C. C. Tu, Dominant gate imperfection in Grover's quantum search algorithm, Phys. Rev. A **61**, 042305–1–5 (2000), older version: LANL e-print quant-ph/9910076. 26
- [29] B. Pablo-Norman und M. Ruiz-Altaba, Robustness of the Quantum Search Algorithm, LANL e-print quant-ph/9903070 v2 (1999). 29
- [30] K. M. Obenland und A. M. Despain, Simulating the Effect of Decoherence and Inaccuracies on a Quantum Computer, LANL e-print quant-ph/9804038 (1999). 29
- [31] P. H. Song, Time evolution of Grover's algorithm with imperfections, LANL e-print quant-ph/0010075 (2000). 29
- [32] R. R. Ernst, G. Bodenhausen und A. Wokaun, *Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions*, Clarendon Press, Oxford, 1987. 32, 47
- [33] T. C. Farrar und J. E. Harriman, *Density matrix theory and its applications in NMR spectroscopy*, The Farragut Press, Madison, WI., 2nd edition, 1992. 32
- [34] I. Niven, *Irrational numbers*, Number 11 in The Carus Mathematical Monographs, Wiley, New York, 3rd edition, 1967, S. 41, Corollary 3.12. 38
- [35] C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, Springer Verlag, Berlin, 3rd edition, 1990. 43
- [36] N. Linden, H. Barjat, R. J. Carbajo und R. Freeman, Pulse sequences for NMR quantum computers: how to manipulate nuclear spins while freezing the motion of coupled neighbours, Chem. Phys. Lett. **305**, 28–34 (1999). 44, 60
- [37] D. W. Leung, I. L. Chuang, F. Yamaguchi und Y. Yamamoto, Efficient implementation of coupled logic gates for quantum computation, Phys. Rev. A **61**, 042310–1–7 (2000). 44, 51, 59, 65
- [38] J. A. Jones und E. Knill, Efficient Refocusing of One-Spin and Two-Spin Interactions for NMR Quantum Computation, J. Magn. Reson. **141**, 322–325 (1999). 44, 51, 59, 66
- [39] U. Haeberlen und J. S. Waugh, Coherent Averaging Effects in Magnetic Resonance, Phys. Rev. **175**(2), 453–467 (1968). 44, 47

Literaturverzeichnis

- [40] N. Chandrakumar und S. Subramanian, *Modern Techniques in High-Resolution FT-NMR*, Springer-Verlag, New York, 1987. 44, 47, 56
- [41] P. Mansfield, Symmetrized pulse sequences in high resolution nmr in solids, *J. Phys. C* **4**, 1444–1452 (1971). 48
- [42] G. Mahler und V. A. Weberruß, *Quantum Networks: Dynamics of Open Nanostructures*, Springer-Verlag, Berlin, 2nd edition, 1998. 49
- [43] N. Linden, Ě. Kupĉe und R. Freeman, NMR quantum logic gates for homonuclear spin systems, *Chem. Phys. Lett.* **311**, 321–327 (1999), older version: LANL e-print quant-ph/9907003. 61
- [44] S. Lloyd, Universal Quantum Simulators, *Science* **273**, 1073–1078 (1996). 80

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen herzlich bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Insbesondere danke ich:

Prof. Dr. G. Mahler für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe, die interessante Aufgabenstellung und seine ständige Gesprächsbereitschaft.

Prof. Dr. G. Wunner für die freundliche Aufnahme an das Institut für Theoretische Physik I.

Prof. Dr. R. Friedrich für die Übernahme des Mitberichts.

Friedemann Tonner für viele interessante Gespräche im gemeinsamen Zimmer, wertvolle Anregungen und die Bereitstellung verschiedener Büroartikel.

Den anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppe, Jochen Gemmer, Thomas Haury, Ilki Kim, Alexander Otte und Thomas Wahl, für die angenehme Arbeitsatmosphäre und Hilfsbereitschaft bei allen Fragen.

Der Kaffeerunde für interessante und abwegige Diskussionen über physikalische und unphysikalische Themen.

Ein ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern, die mir das Studium ermöglicht haben und mich jederzeit nach Kräften unterstützt haben.