

三自旋 XY 链哈密顿量参数间接测量实验演示

郭学仪, 江敏, 郑文强, 李俊, 彭新华

(中国科学技术大学近代物理系, 安徽合肥 230026)

摘要: 实现量子控制和量子计算首先需要测定相关量子系统的哈密顿量参数信息, 然而很多情况下, 量子系统是不完全可测的. 这里使用核磁共振量子模拟器模拟了一个三自旋的 XY 链模型的含时演化, 通过对其中一个核自旋共振信号的读出与数据处理, 成功地精确测出了该 XY 链的各项耦合参数信息.

关键词: 间接哈密顿量测量; XY 自旋链; 量子模拟

中图分类号: O413.1 **文献标识码:** A doi:10.3969/j.issn.0253-2778.2015.03.007

引用格式: Guo Xueyi, Jiang Min, Zheng Wenqiang, et al. Experimental demonstration of indirect Hamiltonian tomography for 3-spin XY chain[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2015, 45(3):220-223.
郭学仪, 江敏, 郑文强, 等. 三自旋 XY 链哈密顿量参数间接测量实验演示[J]. 中国科学技术大学学报, 2015, 45(3):220-223.

Experimental demonstration of indirect Hamiltonian tomography for 3-spin XY chain

GUO Xueyi, JIANG Min, ZHENG Wenqiang, LI Jun, PENG Xinhua

(Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: To realize quantum control and quantum computation on a quantum system, its Hamiltonian parameters must be determined first. However, in many cases a quantum system is access-limited. In our experiment, the dynamic evolution of a 3-spin XY chain was simulated with an NMR quantum simulator. The Hamiltonian parameters of the 3-spin XY chain were determined by measuring only the first spin and processing the data obtained.

Key words: indirect determination of Hamiltonian parameters; XY spin chain; quantum simulation

0 引言

在量子控制和量子计算中, 对量子体系的精密操控是实现相关任务的基本条件. 为了在相应的实验体系中实现复杂操控, 首先需要的就是测量该实验系统中的精确哈密顿量参数. 然而很多实验系统

是不完全可测的, 即在大的实验系统中只有其中部分子系统能够在实验中被观测. 2009年 Burgarth 等提出了间接哈密顿量测量的方法^[1-2], 通过观测子系统得到的信息, 间接计算出整个系统的哈密顿量参数. 该方法需要制备一组特定的初态, 而这在很多系统中也是难以完成的. 同年 Franco 针对自旋链提

收稿日期: 2013-10-28; 修回日期: 2014-01-10

基金项目: 高等学校博士学科点专项科研基金(20113402110044)资助.

作者简介: 郭学仪, 男, 1989年生, 硕士. 研究方向: 核磁共振量子计算. E-mail: guoxueyi@iphy.ac.cn

通讯作者: 彭新华, 博士/教授. E-mail: xhpeng@ustc.edu.cn

出了不需要态初始化的方法^[3],该方法只需要操作自旋链的第一个自旋,通过测量第一个自旋的角动量随时间演化的信息,间接地计算出整个自旋链的哈密顿量参数.之后有其他的理论研究了不同形式的量子体系的哈密顿量间接测量的方案^[4-6],在核磁共振体系上实现了一个 Ising 链的哈密顿量间接测量^[9].

XY 模型的自旋系统是人们研究纠缠和相变等问题非常重要的系统之一,并且在超流、超导和通信方面的研究也起着重要的作用,同时 XY 模型常被用来描述超导薄膜、Josephson 结排列、超导液氮和六元液晶等具有复序参数的实际系统,还可在量子计算中用作量子态的传输^[10].对 XY 模型自旋系统的了解,尤其是哈密顿量的精确测量,在实验工作中是非常有必要的.

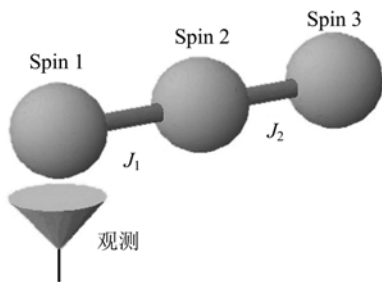
我们使用一个三自旋核磁共振量子模拟器,模拟了一个三自旋的 XY 链模型的含时演化过程,通过测量不同时刻下 XY 链一端的一个自旋的角动量随时间变化的过程,进行数学拟合得到拟合参数,即可计算出整个 XY 链系统中的所有耦合信息.

1 方案简介

实验目的是对一个三自旋 XY 链做哈密顿量参数的间接测量,三自旋 XY 链模型如图 1 所示,其哈密顿量形式表示如下:

$$H = \sum_{i=1}^2 2\pi J_i (I_x^i I_x^{i+1} + I_y^i I_y^{i+1}) \quad (1)$$

式中, I_x^i 和 I_y^i 分别是第 i 个自旋 x 和 y 方向的角动量分量, J_i 为第 i 个自旋与第 $i+1$ 个自旋的耦合参数.



实验目的是确定 XY 自旋链的耦合参数 $\{J_1, J_2\}$, 该系统只有第一个自旋能够被观测

图 1 三自旋 XY 链示意图

Fig. 1 3-spin XY chain model

实验中只有第一个自旋是可以操控和观测的,将第一个自旋制备到 X 方向本征态 $|X_{\pm}^{\pm}\rangle$ 态上,而 XY 链上其他自旋可以处于任意态,测量第一个自

旋角动量 X 方向分量平均值随时间的演化得到

$$M(t) = \langle X_{\pm}^{\pm} | e^{iHt} I_x^1 e^{-iHt} | X_{\pm}^{\pm} \rangle \quad (2)$$

$\{J_1, J_2\}$ 是 $M(t)$ 含时函数的参数.

$M(t)$ 经理论验证可用三角函数来拟合^[3-4]:

$$M(t) = \sum_{j=1}^N A_j \cos(\omega_j t) \quad (3)$$

式中, N 的数目和 XY 链的长度相关^[10], $N = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, n 为自旋链的粒子数目.

将式(2)和式(3)分别进行泰勒展开,其奇数阶系数都为 0.其中,式(2)泰勒展开第二阶和第四阶系数分别为

$$\left. \begin{aligned} \text{第二阶: } & \frac{(2\pi J_1)^2}{4}, \\ \text{第四阶: } & \frac{(2\pi J_1)^4 + (2\pi J_1)^2 (2\pi J_2)^2}{16} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

式(3)泰勒展开第二阶和第四阶系数分别为

$$\left. \begin{aligned} \text{第二阶: } & \sum_{j=1}^N A_j \omega_j^2, \\ \text{第四阶: } & \sum_{j=1}^N A_j \omega_j^4 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

由于式(4)和式(5)的同阶系数相等,可得到方程:

$$\left. \begin{aligned} \frac{(2\pi J_1)^2}{4} &= \sum_{j=1}^N A_j \omega_j^2, \\ \frac{(2\pi J_1)^4 + (2\pi J_1)^2 (2\pi J_2)^2}{16} &= \sum_{j=1}^N A_j \omega_j^4 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

方程组(6)右边的拟合函数参数 $\{A_j, \omega_j\}$ 可以通过拟合实验数据而得到,知道拟合结果后代入方程就可以逐一解出哈密顿量参数 $\{J_i\}$.方程组(6)只需考虑到第二阶和第四阶的系数方程,即可解出三自旋 XY 链的所有耦合参数 $\{J_1, J_2\}$,对于更长的 XY 自旋链,可以按需要增加更高阶系数的方程^[4].

2 量子模拟实验实现

核磁共振量子模拟是用核磁量子系统来模拟研究其他的量子系统,本次实验中是将氟代丙二酸二乙酯分子作为核磁共振量子模拟器来模拟一个三自旋的 XY 链,该样品的分子结构包含 3 个核自旋,如图 2 所示.模拟中将 ^{13}C , ^{19}F , ^1H 分别当作 XY 自旋链的第一、二、三个自旋.实验使用 Bruker AV-400 谱仪,将不同核通道参考频率分别设置为各自核的拉莫频率,这样在旋转坐标系中,就只考虑核自旋之间的耦合项.其核磁哈密顿量形式为

$$H_{\text{sample}} = 2\pi (J_{\text{CF}} I_Z^{\text{C}} I_Z^{\text{F}} + J_{\text{CH}} I_Z^{\text{C}} I_Z^{\text{H}} + J_{\text{FH}} I_Z^{\text{F}} I_Z^{\text{H}}) \quad (7)$$

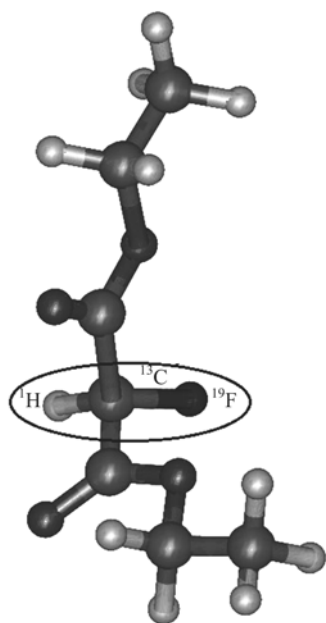


图 2 氟代丙二酸二乙酯分子结构示意图

Fig. 2 Chemical structure of the diethyl-fluoromalonate molecule

具体参数如表 1 所列, T_1 和 T_2 分别是指纵向弛豫时间和横向退相干时间.

表 1 核磁实验参数表

Tab. 1 Experimental parameters of the NMR sample molecule

	^{13}C	^{19}F	^1H
^{13}C	400 MHz	—	—
^{19}F	-194.4 Hz	100 MHz	—
^1H	160.6 Hz	47.6 Hz	376 MHz
T_1/s	2.8	2.9	3.1
T_2/s	1.2	1.1	1.3

该实验不需要作态的初始化,只需要将第一个自旋制备到 X 方向本征态. 实验从热平衡态

$$\rho_{\text{eq}} = \gamma_{\text{C}} I_z^{\text{C}} + \gamma_{\text{F}} I_z^{\text{F}} + \gamma_{\text{H}} I_z^{\text{H}}$$

开始,在第一个自旋上加一个 $\left[\frac{\pi}{2}\right]_y^{\text{C}}$ 脉冲,其他两个自旋的初态不用处理.

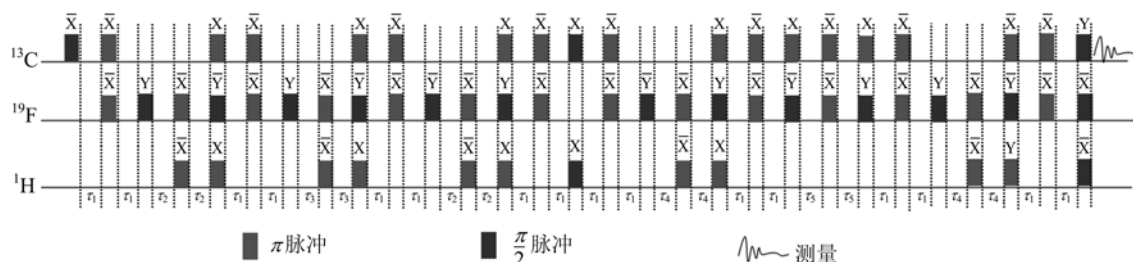


图 3 模拟三自旋 XY 链演化的实验脉冲序列图

Fig. 3 Pulse sequence to simulate 3-spin XY chain evolution

将第一个自旋制备在 X 方向本征态后,就可以模拟 XY 自旋链的含时演化过程. 实验要模拟的三自旋 XY 链的耦合参数为

$$J_1^{\text{sim}} = \frac{70}{2\pi} \text{ Hz}, J_2^{\text{sim}} = \frac{50}{2\pi} \text{ Hz}.$$

三自旋 XY 链的么正演化算符为

$$U(t) = e^{-i[J_1^{\text{sim}}(\hat{X}_1\hat{X}_2 + \hat{Y}_1\hat{Y}_2) + J_2^{\text{sim}}(\hat{X}_2\hat{X}_3 + \hat{Y}_2\hat{Y}_3)]t},$$

可以将该么正演化算符写作^[10]:

$$U(t_k) = e^{-i(\pi/4)\sigma_y^1} e^{i(\pi/4)\sigma_x^3} e^{-i(\alpha_A/2)\sigma_z^1\sigma_z^2} e^{-i(\pi/4)\sigma_y^2} e^{-i\phi_k\sigma_z^2} e^{i(\pi/4)\sigma_y^2} e^{-i(\alpha_A/2)\sigma_z^1\sigma_z^2} e^{i(\pi/4)(\sigma_x^1 + \sigma_x^2)} e^{-i(\pi/4)\sigma_y^1} e^{i(\pi/2)(\sigma_z^1 + \sigma_z^2)} e^{-i(\pi/4)\sigma_z^1} e^{-i(\alpha_B/2)\sigma_z^1\sigma_z^2} e^{-i(\pi/4)\sigma_y^2} e^{-i\phi_k\sigma_z^2} e^{i(\pi/4)\sigma_y^2} e^{i(\alpha_B/2)\sigma_z^1\sigma_z^2} e^{-i(\pi/4)\sigma_x^1} e^{i(\pi/4)\sigma_x^3} \quad (8)$$

式中,

$$\alpha_A = \arcsin \left[\frac{J_2^{\text{sim}}}{\sqrt{(J_1^{\text{sim}})^2 + (J_2^{\text{sim}})^2}} \right],$$

$$\alpha_B = \arcsin \left[\frac{J_1^{\text{sim}}}{\sqrt{(J_1^{\text{sim}})^2 + (J_2^{\text{sim}})^2}} \right],$$

$$\phi_k = \frac{\sqrt{(J_1^{\text{sim}})^2 + (J_2^{\text{sim}})^2}}{2} t_k.$$

演化算符的时间参数 t_k 包含在 ϕ_k 中. 进一步,式

(8)中的 $e^{-i(\alpha_A/2)\sigma_z^1\sigma_z^2}$ 可以拆为

$$e^{-i(\alpha_A/2)\sigma_z^1\sigma_z^2} = e^{-i(\pi/4)\sigma_x^2} e^{-i(\pi/4)\sigma_z^1\sigma_z^2} e^{-i(\pi/4)\sigma_y^2} e^{-i(\alpha_A/2)\sigma_z^1\sigma_z^2} e^{i(\pi/4)\sigma_y^2} e^{i(\pi/2)\sigma_z^2} e^{-i(\pi/4)\sigma_x^2} \quad (9)$$

将式(9)代入式(8)中,得到完全由单自旋操作项和两自旋耦合项组合成的 $U(t_k)$. 核磁共振实验中单自旋操作可以用单个脉冲来实现,而两自旋耦合项可以由脉冲和自由演化组合实现.

将以上推导得到的 $U(t_k)$ 写成实验脉冲序列形式并作简化,得到如图 3 所示的结果.

实验从热平衡态开始,运行如图 3 所示脉冲序列后测量 ^{13}C 的 X 方向角动量平均值 $M(t)$. 脉冲序列中自由演化时间参数为

$$\tau_1 = \frac{1}{4 |J_{CF}|}, \tau_2 = \frac{\alpha_B}{2\pi J_{FH}},$$

$$\tau_3 = \frac{\phi_k}{2\pi J_{FH}}, \tau_4 = \frac{\alpha_A}{2\pi J_{FH}}, \tau_5 = \frac{\phi_k}{2\pi |J_{CF}|}.$$

t_k 取离散的值 $\{t_k = k\Delta t, \Delta t = 7.3 \text{ ms}, k = 0, 1, 2, \dots\}$.

该脉冲序列模拟三自旋 XY 链的含时演化, 演化算符 $U(t_k)$ 的时间参数 t_k 包含在 ϕ_k 中, 而 ϕ_k 包含在脉冲序列参数 τ_3, τ_5 中, 所以通过调节 τ_3, τ_5 来模拟不同长短演化时间的 $U(t_k)$.

实验测量 $M(t)$ 数据如图 4 所示, 该组离散数据点可以用 $M(t) = A\cos(\omega t) + C$ 来拟合, 拟合结果分别为 $A = 0.66 \pm 0.04$, $\omega = 43.6 \pm 0.2 \text{ rad/s}$, $C = 0.35 \pm 0.03$, 置信区间为 95%.

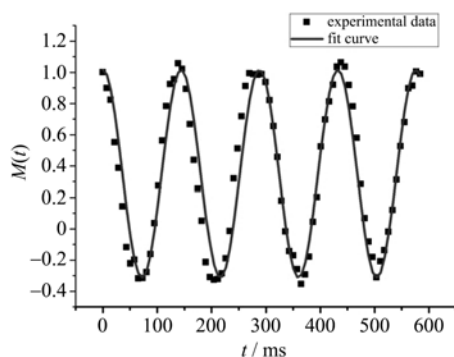


图 4 实验数据和拟合函数图

Fig. 4 Experimental data and fit curve

将所得实验结果的拟合结果代入式(6), 可以得到

$$|J_1^{\text{exp}}| = \frac{71.1 \pm 2.2}{2\pi} \text{ Hz}, |J_2^{\text{exp}}| = \frac{50.5 \pm 2.5}{2\pi} \text{ Hz}.$$

3 误差分析

对比初始设置的值 $\{J_1^{\text{sim}}, J_2^{\text{sim}}\}$ 和实验结果算出的值 $\{J_1^{\text{exp}}, J_2^{\text{exp}}\}$, $J_1^{\text{sim}}, J_2^{\text{sim}}$ 均位于实验结果 95% 置信区间内, 且拟合估计值与初始设置值的偏差均小于 2%. 分析实验和数据处理过程, 实验误差主要来源于模拟、读出和拟合 3 方面. 实验中用三自旋的核磁共振量子模拟器来模拟三自旋 XY 链, 由于环境噪声的影响及射频脉冲序列的不完美性, 实验模拟的三自旋 XY 链的么正演化会有一定的误差; 同时, 实验数据点的读取过程中需要对 NMR 谱线积分, NMR 频谱的基准线噪声与积分范围的选择会使数据读取产生 1% 左右的误差; 最后拟合置信区间为 95% 时, A 的偏差为 ± 0.04 , ω 的偏差为 ± 0.2 , C 的偏差为 ± 0.03 .

4 结论

在核磁共振模拟器上模拟了三自旋 XY 链的含

时演化, 通过测量 XY 自旋链的第一个自旋 X 方向角动量随时间演化的信息, 成功地确定出该系统的各项哈密顿量参数, 验证了自旋链哈密顿量间接测量的方案的有效性. 不需要对量子系统作态初始化这一特性可以突破很多实验条件限制, 使得该方法具有很强的实用性.

针对不同实验模型, 如 Ising 链、XYZ 自旋链等, 可使用类似的基本方法与过程, 只需根据具体自旋链耦合形式, 改变泰勒展开系数方程及拟合函数形式. 该方案可以扩展到大尺度 XY 自旋链和其他自旋链的哈密顿量参数的间接测量.

参考文献 (References)

- [1] Burgarth D, Maruyama K, Nori F. Coupling strength estimation for spin chains despite restricted access[J]. *Physical Review A*, 2009, 79: 020305.
- [2] Burgarth D, Maruyama K. Indirect Hamiltonian identification through a small gateway[J]. *New Journal of Physics*, 2009, 11: 103019.
- [3] Di Franco C, Paternostro M, Kim M S. Hamiltonian tomography in an access-limited setting without state initialization [J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102: 187203.
- [4] Di Franco C, Paternostro M, Kim M S. Bypassing state initialization in Hamiltonian tomography on spin-chains [J]. *International Journal of Quantum Information*, 2011, 9(suppl): 181-187.
- [5] Burgarth D, Maruyama K, Nori F. Indirect quantum tomography of quadratic Hamiltonians [J]. *New Journal of Physics*, 2011, 13: 013019.
- [6] Wiesniak M, Markiewicz M. Finding traps in nonlinear spin arrays[J]. *Physical Review A*, 2010, 81: 032340.
- [7] Burgarth D, Yuasa K. Quantum system identification [J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108: 080502.
- [8] Ali Fasihi M, Tanaka S, Nakahara M, et al. Hamiltonian determination with restricted access in transverse field Ising chain[J]. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2011, 80: 044002.
- [9] Lapasar E H, Maruyama K, Burgarth D, et al. Estimation of coupling constants of a three-spin chain: A case study of Hamiltonian tomography with nuclear magnetic resonance[J]. *New Journal of Physics*, 2012, 14: 013043.
- [10] Zhang J, Long G L, Zhang W, et al. Simulation of Heisenberg XY interactions and realization of a perfect state transfer in spin chains using liquid nuclear magnetic resonance[J]. *Physical Review A*, 2005, 72: 012331.