

Dipl.-Phys. Peter Karbach

Numerische Untersuchungen optimierter Pulse

zur Unterdrückung transversaler Relaxation eines Zwei-Niveau-Systems gekoppelt an ein Bad.

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.).

10. April 2012

Diese Arbeit wurde durch Dipl.-Phys. Peter Karbach, geboren am 1. Juli 1980 in Biedenkopf (Hessen), am Lehrstuhl Theoretische Physik I der Fakultät für Physik der TU Dortmund angefertigt. Sie wurde durch Prof. Dr. Götz S. Uhrig betreut.

Dipl.-Phys. Peter Karbach

Numerische Untersuchungen optimierter Pulse

zur Unterdrückung transversaler Relaxation eines Zwei–Niveau–Systems gekoppelt an ein Bad.

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.).

10. April 2012

Diese Arbeit wurde durch Dipl.-Phys. Peter Karbach, geboren am 1. Juli 1980 in Biedenkopf (Hessen), am Lehrstuhl Theoretische Physik I der Fakultät für Physik der TU Dortmund angefertigt. Sie wurde durch Prof. Dr. Götz S. Uhrig betreut.

Mitglieder der Prüfungskommission

- Prof. Dr. Bernhard Spaan (Vorsitzender)
- Prof. Dr. Götz S. Uhrig (Erstgutachter)
- Prof. Dr. Joachim Stolze (Zweitgutachter)
- Dr. Bärbel Siegmann (Vertreterin der wissenschaftlichen
Mitarbeiter)

Diese Arbeit wurde mit KOMA-Script und L^AT_EX gesetzt.

Iucundi acti labores.

Marcus Tullius Cicero

*Für Katharina, die mich in einer sehr schweren Zeit immer wieder gestützt und
wieder zum Lächeln gebracht hat.*

Inhaltsverzeichnis

Inhalt	viii
1. Einleitung	1
1.1. Motivation	1
1.1.1. Quantencomputing	1
1.1.2. Dekohärenz	4
1.2. Experimentelle Systeme	6
1.2.1. NMR	7
1.2.2. Quantenpunkte	12
1.3. Bisherige Arbeiten	14
1.3.1. Pulssequenzen	14
1.3.2. Pulsformung	18
2. Analytische Resultate	21
2.1. Pulsoptimierung I	21
2.1.1. Einleitung	21
2.1.2. Allgemeine Formeln	22
2.1.3. Entwicklung bis zur zweiten Ordnung	25
2.1.4. Optimierte Pulse	27
2.2. Pulsoptimierung II	35
2.2.1. Einleitung	35
2.2.2. Optimierte Pulse	43
3. Numerische Analysen	51
3.1. Allgemeines	51
3.1.1. Potenzreihenentwicklung	53
3.2. Überblick der Modelle	55
3.2.1. Überblick zum Kettenmodell	55
3.2.2. Analyse des Kettenmodells I	61
3.2.3. Analyse des Kettenmodells II	71
3.2.4. Fazit zum Kettenmodell	76
3.2.5. Überblick zum dipolaren Modell	77
3.2.6. Analyse des Dipolaren Modells I	79
3.2.7. Analyse des dipolaren Modells II	106
3.2.8. Fazit zum dipolaren Modell	112
4. Fazit und Ausblick	113
4.1. Zusammenfassung	113
4.2. Ausblick	114
A. Mathematischer Anhang	115
A.1. Magnus-Entwicklung	115
A.1.1. Zeitordnung	115
A.1.2. Die Magnus-Entwicklung	117

B. Programme	119
B.1. Relevante Codebeispiele	119
B.1.1. Matrixexponential	119
B.1.2. Zufallszahlen	121
B.2. Laufzeit und Speicherbedarf	121
B.3. Kurzanleitungen der benutzten Programmen	123
B.3.1. dipolar	123
B.3.2. getetas	124
B.3.3. datafit3	126
Abkürzungsverzeichnis	131
Literaturverzeichnis	133
Danksagung	139

1. Einleitung

1.1. Motivation

1.1.1. Quantencomputing

Auch diese Arbeit kommt nicht umhin, darauf hinzuweisen, dass die zunehmende Miniaturisierung in der Computertechnik früher oder später dazu führen wird, dass Schaltungselemente wie Transistoren aufgrund ihrer Abmessungen starke Quanteneffekte aufweisen werden¹, die einerseits eine neue Form an Schaltungstechnik ermöglichen, dieser aber gleichzeitig auch bedürfen.

Der Effekt der Miniaturisierung findet seine mathematische Formulierung im so genannten **Moore'schen Gesetz** welches Gordon Moore² im Jahr 1965 (Moore 1965) formulierte. In der heute üblichen Fassung besagt es, dass sich die Zahl der Transistoren auf einem handelsüblichen Prozessor von 1 inch² ($\approx 6.5\text{cm}^2$) Größe im Zeitraum von 18 Monaten verdoppelt. Grafik 1.1 zeigt, dass es der Firma Intel gelungen ist, diesen Trend bislang einzuhalten.

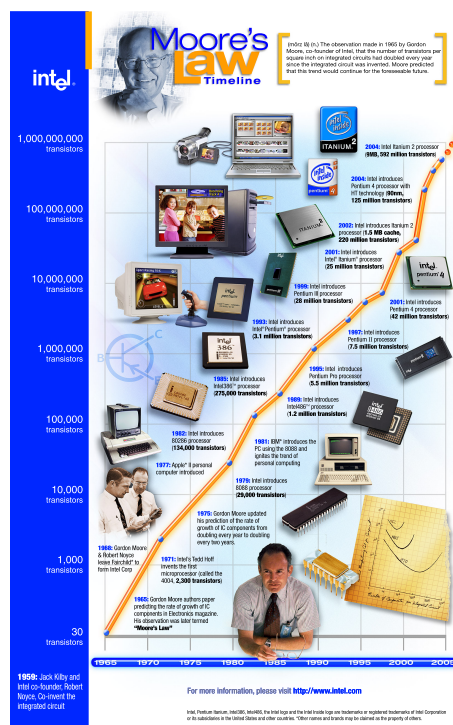


Abbildung 1.1 Zeitlinie der Zahl der Transistoren pro 1 inch². Quelle: <http://www.intel.com/technology/mooreslaw/index.htm>.

¹Wobei ich darauf hinweisen möchte, dass bereits heute Halbleiterbausteine nur mit quantenmechanischen Rechnungen erklärbar sind. Als Stichwort sei hier nur die Bandstruktur erwähnt.

²Gordon Earle Moore (1929 - heute), Mitbegründer der Firma Intel.

Aber die Halbleiterindustrie möchte die Miniaturisierung auch weiter vorantreiben. Die Gründe hierfür liegen auf der Hand, kleinere Strukturen können schneller miteinander kommunizieren und sind unter anderem deshalb schneller. Zudem verbrauchen kleinere Bauelemente weniger Energie und produzieren weniger Abwärme. Die „International Technology Roadmap for Semiconductors“ (ITRS, <http://www.itrs.net>) ist in Abbildung 1.2 dargestellt.

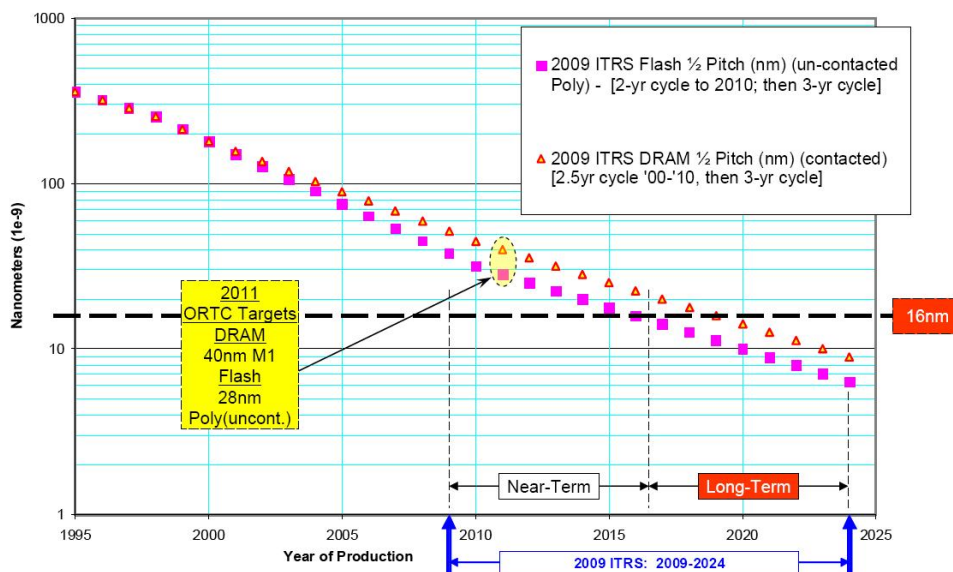


Abbildung 1.2 Planungsgrundlage der ITRS vom 16. Dezember 2009 (Winter Conference). Aufgetragen ist die vorausgesagte/historische Bauteilgröße gegen die Jahreszahl. Die Schranke von 16 nm stellt dabei eine theoretische Grenze dar, ab der quantenmechanische Tunneleffekte einsetzen und so einen klassischen Transistor fast unmöglich machen (Zhirnov et al. 2003). Quelle: <http://www.itrs.net>

Die Quantenmechanik stellt aber nicht nur ein Hindernis im Sinne der klassischen Datenverarbeitung dar, sie bietet auch Möglichkeiten, klassische Probleme effektiv zu lösen. Exemplarisch seien hier

Problem	$\mathcal{O}(\text{klass.})$	$\mathcal{O}(\text{quant.})$
Primfaktorzerlegung	$\mathcal{O}(\exp[c(\log n)^{1/3}(\log \log n)^{2/3}])$	$\mathcal{O}((\log n)^3)$ ³
Suche in unstrukturierten Daten	$\mathcal{O}(n)$	$\mathcal{O}(\sqrt{n})$ ⁴

genannt. Im Falle der Primfaktorzerlegung bezeichnet n die zu faktorisierende Zahl; im Rahmen der Suche innerhalb unstrukturierter Daten hingegen ist mit n der Umfang der Datenbasis bezeichnet.

Die meisten klassischen Algorithmen zur **Primfaktorzerlegung** skalieren exponentiell mit der Größe der zu faktorisierenden Zahl n . Eine Übersicht findet man unter <http://www.frenchfries.net/paul/factoring/theory/index.html>. Das beste klassische Verfahren (Zahlensieb) skaliert gemäß

$$\text{Laufzeit} \propto \mathcal{O} \left\{ \exp \left[c (\log m)^{1/3} (\log [\log m])^{2/3} \right] \right\} . \quad (1.1.1a)$$

³Shor-Algorithmus; Peter Shor (1959-heute), US-Amerikanischer Informatiker/Mathematiker

⁴Grover-Algorithmus; Lov Kumar Grover (1971-heute), Indisch-amerikanischer Informatiker

Der angesprochene Shor-Algorithmus nutzt die Quantenfouriertransformation und erreicht eine Skalierung gemäß

$$\text{Laufzeit} \propto \mathcal{O}\{(\log n)^3\} . \quad (1.1.1b)$$

Da die Primfaktorzerlegung Bestandteil moderner Kryptoverfahren (RSA-Verfahren, siehe (Singh 2003)) ist, ist mit dem dem Shor-Algorithmus die Quanteninformationsverarbeitung schlagartig für viele Kreise (Militärs, Geheimdienste, Wirtschafts- und Bankenverbände) interessant geworden. Für Detailinformationen zu den angesprochenen Algorithmen verweise ich auf (Stolze & Suter 2004) und dort auf Kapitel 8.

Die Quanteninformationsverarbeitung ermöglicht darüber hinaus aber auch nicht nur die Dechiffrierung bestimmter Kryptoverfahren, sie bietet auch – mathematisch beweisbar – sichere Kommunikationsmöglichkeiten. Basierend auf dem so genannten „No cloning theorem“, das besagt, dass sich ein quantenmechanischer Zustand nicht kopieren lässt, ermöglichen Kommunikationsprotokolle wie BB84 (Bennett & Brassard 1984) sicheren Informationsaustausch. Weitere Details entnehme man Büchern wie (Stolze & Suter 2004) und (Nielsen & Chuang 2000).

Nachdem nun das „Warum“ näher betrachtet wurde, möchte ich im Folgenden kurz auf das „Wie“ eingehen. Derzeit existiert eine Vielzahl an vorgeschlagenen Systemen, deren quantenmechanische Eigenschaften sie als mögliche Realisationen eines Quantenrechners in Frage kommen lassen. Im folgenden Abschnitt (Abschnitt 1.1.2) werden die geforderten und bislang schon realisierten Kriterien eingehender vorgestellt⁵

Um trotz der Vielzahl möglicher Realisationen systemunabhängige Konzepte zu formulieren und untersuchen, bedient man sich einer Sprache, die Elemente der klassischen Schaltungstechnik, der Informatik und Begriffe der Kernspinresonanz nutzt. Ersteres ist nur konsequent, da man letztendlich einen Rechner bauen möchte; Letzteres ist hauptsächlich historisch bedingt, da die Kernspinresonanz als Technik direkt quantenmechanische Eigenschaften eines Systems (nämlich den Kernspin) anspricht und auch zu den ersten „Spielwiesen“ der Quanteninformationsverarbeitung gehörte. Die bislang zumeist betrachteten Zwei-Niveau-Systeme entsprechen einem Kernspin von $S = 1/2$ =Qubit.

Da sich der Großteil der publizierten Arbeiten mit **Zwei-Niveau-Systemen** befassen, befasst sich auch diese Arbeit nur mit derartigen Systemen. Die unten gezeigte Darstellung eines Qubits genügt dieser Einschränkung.

An Stelle des klassischen Bits, also eines An- oder Aus-Zustandes, tritt ein quantenmechanisches System, das man analog als **Qubit** bezeichnet. Die Wellenfunktion $|\psi\rangle$ eines Qubits setzt aus der Überlagerung zweier Zustände⁶ $|0\rangle, |1\rangle$

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad \text{mit } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (1.1.2a)$$

zusammen. Aufgrund der Normierungseigenschaft schreibt man auch

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2) |1\rangle . \quad (1.1.2b)$$

Die beiden Winkel θ und ϕ interpretiert man als die Richtungswinkel eines Vektors auf der Einheitskugel – der so genannten **Blochkugel**⁷.

⁵Als Stichwort seien hier vorab die DiVincenzo-Kriterien (DiVincenzo 2000) genannt.

⁶Die Benennung dieser Zustände erfolgt in Analogie zu den klassischen Bitzuständen 0 und 1 bzw. „An“ und „Aus“.

⁷Felix Bloch (1905 - 1981), schweizerisch-amerikanischer Physiker, Nobelpreis für Physik 1952.

Weiterhin spricht man auch im Bereich der Quanteninformationsverarbeitung von **Gattern**. Wie in der klassischen Schaltungstechnik, formt ein Gatter ein Qubit – also einen quantenmechanischen Zustand – um. Meist geschieht dies abhängig von anderen Eingabezuständen.

Anders als in der klassischen Informatik, benötigt die etablierte Form der Quanteninformationsverarbeitung an jedem Gatter genau so viele Ausgabe- wie Eingabekanäle. Zum Beispiel hat ein klassisches AND-Gatter zwei Eingänge, aber nur einen Ausgang. Das quantenmechanische Analogon hingegen benötigt zwei Eingänge und zwei Ausgänge. Dies liegt daran, dass man bei der Beschreibung auf unitäre Zeitentwicklung des Systems angewiesen ist. Umgangssprachlich ist damit auch gefordert, dass sich der Rechner in „beide“ Richtungen⁸ betreiben lässt, man spricht hier von reversiblen Gattern.

Zum jetzigen Zeitpunkt bedürfen verschiedene Realisationen bzw. deren Gatter der externen Einflussnahme durch den Benutzer. Dies geschieht im Beispiel der gepulsten Kernspinresonanz (s. Kapitel 1.2.1) in Form von elektromagnetischen Pulsen, deren Frequenz, Dauer und Amplitude so eingestellt sind, dass sie die Qubits in geeigneter Art und Weise kontrollieren. Ein Beispiel eines solchen Gatters ist das **Hadamardgatter**⁹, dessen Wirkungsweise auf einen Spin $1/2$ gemäß

$$\hat{H} = (\hat{X} + \hat{Z}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.1.3)$$

in der Basis der Eigenzustände der Paulimatrix σ_z beschrieben wird. Bestandteile dieses Gatters sind Drehungen um die x - bzw. z -Achse im Spinraum mit Winkel π . Diese Drehungen müssen – im Falle der Kernspinresonanz – durch Pulse von außen appliziert werden

Die Optimierung und der Test dieser grundlegenden Pulse ist Inhalt dieser Arbeit.

1.1.2. Dekohärenz

Der US-Amerikaner David P. DiVincenzo (DiVincenzo 2000) hat fünf Kriterien aufgestellt, die ein sinnvoller Quantencomputer erfüllen sollte. Sie lauten¹⁰:

1. Be a scalable physical system with well-defined qubits
2. Be initializable to a simple fiducial state such as $|000\dots\rangle$
3. Have much longer decoherence times
4. Have a universal set of quantum gates
5. Permit high quantum efficiency, qubit-specific measurements.

Die folgenden Punkte stellen zusätzliche Anforderungen der Quantenkommunikation dar:

6. The ability to interconvert stationary and flying qubits
7. The ability faithfully to transmit flying qubits between specified locations.

Übersetzt¹¹ ins Deutsche lauten diese Kriterien.

1. Das System muss wohldefinierte Qubits besitzen und skalierbar sein, d.h. es muss prinzipiell auf beliebig viele Qubits erweiterbar sein.
2. Es muss möglich sein, die Qubits in einem reinen Zustand zu präparieren (mindestens in den Zustand $|000\dots\rangle$).

⁸Gemeint sind die Richtungen Eingabe → Ausgabe und Ausgabe → Eingabe.

⁹Jacques Salomon Hadamard (1865 – 1963), französischer Mathematiker

¹⁰(Quelle: http://www.research.ibm.com/ss_computing/)

¹¹Quelle: Wikipedia, <http://de.wikipedia.org/wiki/Qubit> (Stand: 25.12.2011)

3. Das System muss eine hinreichend lange Dekohärenzzeit aufweisen.
4. Das System muss die Implementierung eines universellen Satzes von Quantengattern erlauben. Ein Beispiel wäre z. B. alle 1-Qubit-Gatter und zusätzlich das CNOT-Gatter.
5. Es muss möglich sein, jedes einzelne der Qubits gezielt zu messen.
6. Es muss möglich sein, stationäre Qubits in bewegliche Qubits zu transformieren und umgekehrt.
7. Ein Austausch der beweglichen Qubits muss zwischen entfernten Orten möglich sein.

Jeder dieser Punkte stellt eine Herausforderung an die experimentelle/praktische Realisierung eines Quantenrechners oder der Quantenkommunikation dar. Abbildung 1.3 zeigt an, welche experimentellen Systeme im Jahr 2004 welches Kriterium bereits erfüllt haben, beziehungsweise gute Chancen haben, dies zu realisieren.

QC Approach	The DiVincenzo Criteria							
	Quantum Computation						QC Networkability	
	#1	#2	#3	#4	#5		#6	#7
NMR								
Trapped Ion								
Neutral Atom								
Cavity QED								
Optical								
Solid State								
Superconducting								
Unique Qubits	This field is so diverse that it is not feasible to label the criteria with "Promise" symbols.							

Legend: = a potentially viable approach has achieved sufficient proof of principle
 = a potentially viable approach has been proposed, but there has not been sufficient proof of principle
 = no viable approach is known

Abbildung 1.3 Welche Technik erfüllt derzeit (2004) welches DiVincenzo-Kriterium? Die Spaltenzahl entspricht der Nummerierung der Liste am Anfang des Kapitels 1.1.2. Quelle: <http://qist.lanl.gov/>.

Allen Realisierungen ist gemein, dass sie mit so genannter Dekohärenz zu kämpfen haben. Allgemein versteht man unter Dekohärenz ungewollte Wechselwirkung eines quantenmechanischen Systems (eines Qubits) mit seiner Umgebung, so dass sich dessen Zustand unkontrolliert verändert. Durch Wechselwirkung des Qubits mit der Umgebung¹² ändert ein Qubit seinen Zustand und ist somit nicht mehr oder nur teilweise für Rechenoperationen verwendbar. Die typischen Zeitskalen, in denen ein Zustand seine Information nicht verliert, bezeichnet man als Kohärenzzeiten. Daher ist es ein wesentliches Ziel der Grundlagenforschung der Quanteninformationsverarbeitung, solche Kopplungen zu minimieren bzw. die natürlichen Kohärenzzeiten zu verlängern.

Allerdings profitiert nicht nur die Quanteninformationsverarbeitung von diesen Anstrengungen. Auch allgemeine Messverfahren benötigen die Kontrolle quantenmechanischer Zustände, so dass

¹²Diese kann aus anderen Qubits oder weiteren Freiheitsgrade des betrachteten Systems (Phononen, Kristallfelder, anderen Spins, etc.) bestehen.

gezielt bestimmte Informationen abgefragt werden können, ohne dass – unbekannte oder unkontrollierte – Störeinflüsse die Messung beeinflussen.

Aufgrund der Vielzahl von möglichen Störeinflüssen ist es müßig, diese alle im Einzelnen aufzuzählen. Speziell die Kernspinresonanz unterscheidet zwischen

- Spin–Spin– und
- Spin–Gitter–Relaxation.

Alternativ bezeichnet man die Spin–Spin–Relaxation auch als transversale Relaxation oder als Dephasierung. Anstelle von Spin–Gitter–Relaxation wird auch oft von longitudinaler Relaxation oder Besetzungsdekohärenz gesprochen.

Kohärenz bzw. Dekohärenz ist eng mit dem Relaxationsverhalten¹³ verbunden. In der Kernspinresonanz werden hier die charakteristischen Zeiten (Kohärenzzeiten)

- T_1 : Spin–Gitter–Relaxation und
- T_2 : Spin–Spin–Relaxation

mit Hilfe der Blochgleichungen (1.2.7) eingeführt.

Wie kommt es denn zu Spin–Gitter–Relaxation? Befindet sich das System im statistischen Gleichgewicht, so sollte dieser Mechanismus nicht mehr zum Tragen kommen. Da die Quanteninformationsverarbeitung aber einen wohldefinierten Ausgangszustand benötigt, in den es zuvor durch den Experimentator überführt werden muss, kommt er aber doch zum Tragen. Im Rahmen der Kernspinresonanz geschieht diese Präparation meist durch ein statisches starkes Magnetfeld, an dem sich die Kernspins orientieren.

Die anschließenden Operationen (zeitabhängige magnetische Anregungen senkrecht zum statischen Feld) treiben das System aus diesem Zustand heraus. Sofern diese Operationen nicht schnell genug vonstatten gehen, wird das System spontan nach einer gewissen Zeit (T_1) wieder den wohldefinierten Zustand bzw. den Grundzustand annehmen.

Die Kernspinresonanz detektiert aber keine einzelnen Kernspins, sondern sie misst die magnetische Antwort des Gesamtsystems. Durch Wechselwirkung der Qubits mit magnetischen Momenten der Umgebung¹⁴ verlieren diese ebenfalls ihre Kohärenz, was sich im Experiment oft durch Signalverlust bemerkbar macht. In diesem Fall spricht man von Dephasierung. Statt eines kohärenten Zustands liegt eine statistische Verteilung der Qubitzustände vor, wie in Abbildung 1.4 skizziert ist.

Für weitere Informationen empfehle ich die Arbeiten (Dass 2005) und (Leggett 2002).

1.2. Experimentelle Systeme

Nachdem nun einige Worte zu der Problematik eines Quantenrechners gefallen sind, möchte ich nun speziell auf zwei mögliche experimentelle Techniken bzw. Probenklassen eingehen, die direkt von den vorgestellten Resultaten profitieren können. Ich beginne mit einer oberflächlichen Beschreibung der Kernspinresonanz und werde mich im Anschluss mit Halbleiternanostrukturen (Quantenpunkten) befassen.

¹³Also dem zeitlichen Übergang in einen (energetisch) günstigeren quantenmechanischen Zustand.

¹⁴Dies sind meist ebenfalls Kernspins.

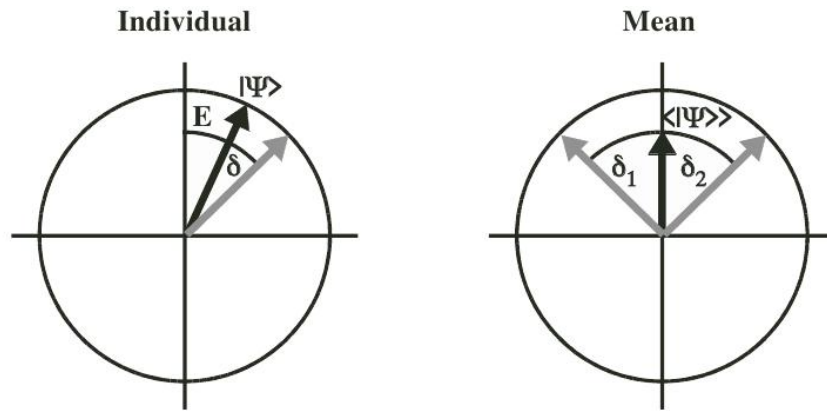


Abbildung 1.4 Kohärenter und inkohärenter Anteil der Zeitentwicklung. Dargestellt ist die Dephasierung zweier oder mehrere Spins aufgrund abweichender zeitlicher Evolution voneinander. Quelle Stolze & Suter (2004).

1.2.1. NMR

Allgemeiner Gegenstand dieser Arbeit sind Zwei-Niveau-Systeme. Derartige Systeme sind unter anderem in verschiedenen Kernspinsystemen realisiert, nämlich solchen deren Kernspin $1/2$ beträgt.

Praktischerweise gibt es eine Vielzahl möglicher Elemente und Verbindungen, die dieser Anforderung gerecht werden. Abbildung 1.5 stellt dabei keine vollständige Liste der in Frage kommenden Elemente dar. Wie man erkennt, ist der Kernspin isotonenabhängig, so dass sich hier eine Vielzahl an Möglichkeiten eröffnet. Eine ausführlichere Liste an Elementen und Verbindungen nebst Aufstellung von Kernspins, dem gyromagnetischem Verhältnis und Kopplungskonstanten findet man in (Stone 2005).

		Spin																									
		1/2	3/2	5/2	7/2	9/2	1	3	5	6	7																
I	¹ H ² D																	VIII	³ He								
	⁶ Li ⁷ Li ⁹ Be																	III	¹⁰ B ¹¹ B	IV	¹² C	V	¹⁴ N ¹⁵ N	VI	¹⁷ O	VII	¹⁹ F ²¹ Ne
	²³ Na ²⁵ Mg	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	VIIIa	VIIIc	IB	IIB	²⁷ Al	²⁹ Si	³¹ P	³³ S	³⁵ Cl ³⁷ Cl	Ar											
	³⁹ K ⁴¹ K ⁴³ Ca	⁴⁵ Sc ⁴⁷ Ti ⁴⁹ Ti ⁵⁰ V ⁵¹ V ⁵² Cr ⁵⁵ Mn ⁵⁶ Fe ⁵⁹ Co ⁶⁰ Ni ⁶³ Cu ⁶⁵ Cu ⁶⁷ Zn	⁶⁹ Ga ⁷¹ Ga ⁷³ Ge ⁷⁵ As ⁷⁷ Se ⁷⁹ Br ⁸¹ Br ⁸³ Kr																								
	⁸⁵ Rb ⁸⁷ Rb ⁸⁹ Sr	⁸⁹ Y ⁹¹ Zr ⁹³ Nb ⁹⁵ Mo ⁹⁷ Mo Tc ⁹⁹ Ru ¹⁰¹ Ru ¹⁰³ Rh ¹⁰⁵ Pd ¹⁰⁷ Ag ¹⁰⁹ Ag ¹¹¹ Cd ¹¹³ Cd ¹¹⁵ In ¹¹⁷ In ¹¹⁹ Sn ¹²¹ Sb ¹²³ Sb ¹²⁵ Te ¹²⁷ I ¹²⁹ Xe ¹³¹ Xe																									
	¹³³ Cs ¹³⁵ Ba ¹³⁷ Ba	¹³⁷ Lu ¹³⁹ Lu ¹⁷⁷ Hf ¹⁷⁹ Hf ¹⁸¹ Ta ¹⁸³ W ¹⁸⁵ Re ¹⁸⁷ Re ¹⁸⁷ Os ¹⁸⁹ Os ¹⁹¹ Ir ¹⁹³ Ir ¹⁹⁵ Pt ¹⁹⁷ Au ¹⁹⁹ Hg ²⁰¹ Hg ²⁰³ Tl ²⁰⁵ Tl ²⁰⁷ Pb ²⁰⁹ Bi	Po At Rn																								
	Fr Ra	Lr Unq Unp Unh Uns Uno Mt Uun Uuu Uub Uut Uuq Uup Uuh Uus Uuo																									
	Lanthanide	¹³⁹ La ¹³⁹ La Ce ¹⁴¹ Pr ¹⁴³ Nd ¹⁴⁵ Nd Pm ¹⁴⁷ Sm ¹⁴⁹ Sm ¹⁵¹ Eu ¹⁵³ Eu ¹⁵⁵ Gd ¹⁵⁷ Gd ¹⁵⁹ Tb ¹⁶¹ Dy ¹⁶³ Dy ¹⁶⁵ Ho ¹⁶⁷ Er ¹⁶⁹ Tm ¹⁷¹ Yb ¹⁷³ Yb																									
	Actinide	Ac Th Pa ²³⁸ U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No																									

Abbildung 1.5 Periodensystem der Elemente mit Farbkodierung der Kernspins. Erstellt aus Angaben von <http://www.pascal-man.com/periodic-table/periodictable.html> und <http://www.bruker-nmr.de/guide/eNMR/chem/NMRnuclei.html>.

Die Grundlage der magnetischen Kernspinresonanz¹⁵ besteht in der Ankopplung eines magnetischen Moments (hier eines Spins) an ein magnetisches Feld. Betrachtet man ein System mit Spin

¹⁵Nuclear Magnetic Resonance (NMR)

S , so beträgt dessen Entartungsgrad ohne Magnetfeld $2S + 1$. Nach Anlegen eines Magnetfeldes B_0 ist diese Entartung aufgehoben und man erhält Niveaus mit Energiedifferenzen

$$\Delta E = \gamma \hbar B_0 . \quad (1.2.1)$$

Der Faktor γ wird als gyromagnetisches Verhältnis bezeichnet und hat im Falle von Wasserstoffkernen (Protonen) den Wert¹⁶

$$\gamma(^1\text{H}) = 267.522 \times 10^6 \text{ s}^{-1} \text{ T}^{-1} . \quad (1.2.2)$$

Die folgende Tabelle 1.2 gibt eine Übersicht bestimmter Spin- $1/2$ Isotope, ihres natürlichen Auftretens und des zugehörigen gyromagnetischen Verhältnisses γ .

Isotop	Natürliches kommen [%]	Vor-	$\gamma [1 \times 10^6 \text{ rad s}^{-1} \text{ T}^{-1}]$
^1H	≈ 100		267.522
^3H	≈ 0		285.349
^{13}C	1.1		67.283
^{15}N	0.37		-27.126
^{19}F	≈ 100		251.815
^{29}Si	4.7		108.394

Tabelle 1.2 Tabelle der gyromagnetischen Verhältnisse einiger Isotope. Aus (Levitt 2005).

Obwohl im Folgenden das Plancksche¹⁷ Wirkungsquantum \hbar meist zu eins gewählt wird, und so alle Energien in Frequenzeinheiten angegeben werden, soll wenigstens einmal der einheitenbehaftete Zahlenwert

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,571\,628(53) \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (1.2.3)$$

genannt werden.

Legt man ein starkes magnetisches Feld \vec{B}_0 (zum Beispiel in z -Richtung) an, so richten sich die Spins einer Probe in einem gewissen Zeitraum, der mit der Relaxationszeit T_1 bezeichnet wird, in Richtung dieses Feldes aus und die energetische Entartung ist gemäß Gleichung (1.2.1) aufgehoben. In den meisten Fällen strahlt man nun senkrecht zu \vec{B}_0 (also in x - oder y -Richtung) ein Feld der Frequenz ω und Amplitude v ein. Der zusätzliche Term des Hamiltonoperators sieht dann wie folgt aus

$$\mathcal{H}_{\text{field}} = -\gamma \hbar v_x S_x \cos \omega t . \quad (1.2.4)$$

Dieses Feld lässt nur Übergänge mit magnetischen Quantenzahlen $m = m' \pm 1$ zu¹⁸. Das eingestrahelte Photon wird also dann absorbiert, wenn es die Energiedifferenz zweier benachbarter Niveaus trifft, also

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \gamma B_0 \quad (1.2.5)$$

gilt. Die Tatsache, dass sich die \hbar hier wegheben kann nach Slichter¹⁹ so gedeutet werden, dass dieser Vorgang auch in einem klassischen – nicht quantenmechanischem – Bild erklärt werden

¹⁶Die Einheit T steht für Tesla. Benannt nach Nikola Tesla (1856-1943), serbisch-amerikanischer Erfinder und Ingenieur.

¹⁷Max Planck (1858-1947), Nobelpreis in Physik 1918.

¹⁸Der Spinoperator $S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$ ist dafür verantwortlich.

¹⁹(Slichter 1992)

darf. Viele Lehrbücher der Kernspinresonanz betrachten daher erst ein klassisches Bild, in dem Spinvektoren auf der Blochkugel rotieren und präzedieren und behandeln erst später die zugrundeliegende Quantenmechanik in Form von Dichtematrizen und Hamiltonoperatoren.

Man beachte weiterhin, dass (1.2.4) prinzipiell ein ewig andauerndes Feld beschreibt. Praktisch werden die meisten Experimente mit endlichen Pulsen durchgeführt. Dies hat mehrere Ursachen.

Zum einen kann man sich von der apparativen Seite her auf **eine Spule** zur Erzeugung des Hochfrequenzpulses und der Detektion der Systemantwort beschränken²⁰. Dies spart aufwändige Spulentechnik an der Probe.

Zum anderen wird das experimentelle Anwendungsspektrum durch Pulstechniken gegenüber reinen kontinuierlichen Aufbauten erweitert. Durch die Messung des zeitlichen Verlaufs der Systemantwort (FID, engl. Free Induction Decay) kann man unter anderem Aussagen über Relaxationsprozesse des untersuchten Systems ableiten. Also kann an einem Pulsspektrometer eine breitere Klasse an Experimenten durchgeführt werden.

Weiterhin ist es möglich, mit **einem Puls** viele Kernspins gleichzeitig zu adressieren, da die Spektralkomponenten eines Pulses viele Frequenzen umfassen. Außerdem sind Pulsmethoden meist schneller als kontinuierliche Verfahren (CW, engl. continuous wave).

Man kann sich leicht vorstellen, dass die Linienaufspaltung (1.2.1) bei der Anwesenheit vieler Spins innerhalb eines Moleküls stark durch lokale Felder, welche durch chemische Bindungen oder andere Wechselwirkungen erzeugt werden, beeinflusst wird. Man spricht in diesem Zusammenhang von chemischer Verschiebung (engl. chemical shift). Diese chemische Verschiebung δ wird über

$$\delta = \frac{\omega^0 - \omega_{\text{TMS}}^0}{\omega_{\text{TMS}}^0} \quad (1.2.6)$$

definiert. Die Frequenz ω^0 bezeichnet die Larmorfrequenz des Kerns von Interesse, diese wird dann in Bezug zu einer Referenz ω_{TMS}^0 (gemessen bei gleichen Voraussetzungen) gestellt²¹. Die chemische Verschiebung ist zahlenmäßig sehr klein ($\approx 1 \times 10^{-6}$) ist, dies wird meist durch ppm (parts per million) abgekürzt.

Die chemische Verschiebung ermöglicht es, einzelne Subgruppen einer Verbindung zu identifizieren und stellt so ein mächtiges Werkzeug der analytischen Chemie dar. Ein Beispiel eines solchen Spektrums ist in Abbildung 1.6 dargestellt.

Die Kernspinresonanz kennt darüber hinaus eine Vielzahl verschiedener Kopplungsmechanismen, die in Abbildung 1.7 dargestellt werden und in Tabelle 1.3 mit ihren Hamiltonoperatoren und typischen Größenordnungen vorgestellt werden.

Eine mögliche klassische Beschreibung dekohärenter Einflüsse – also unerwünschter Störungen/-Kopplungen im System – liefern die so genannten Blochgleichungen

$$\frac{dM_z}{dt} = \frac{M_0 - M_z}{T_1} + \gamma (\vec{M} \times \vec{H})_z \quad (1.2.7a)$$

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma (\vec{M} \times \vec{H})_x - \frac{M_x}{T_2} \quad (1.2.7b)$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma (\vec{M} \times \vec{H})_y - \frac{M_y}{T_2} . \quad (1.2.7c)$$

Diese kommen hauptsächlich bei der experimentellen Bestimmung der Relaxationszeiten T_1 und T_2 zur Anwendung.

²⁰Allerdings müssen Sendekanal und Empfangskanal voneinander getrennt werden, da sonst die Sendeleistung die empfindliche Signalverarbeitung des Empfängers überlasten würde.

²¹Der Index TMS steht für Tetramethylsilan $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$, was als Referenz für 1 H, 13 C und 29 Si genutzt wird/wurde.

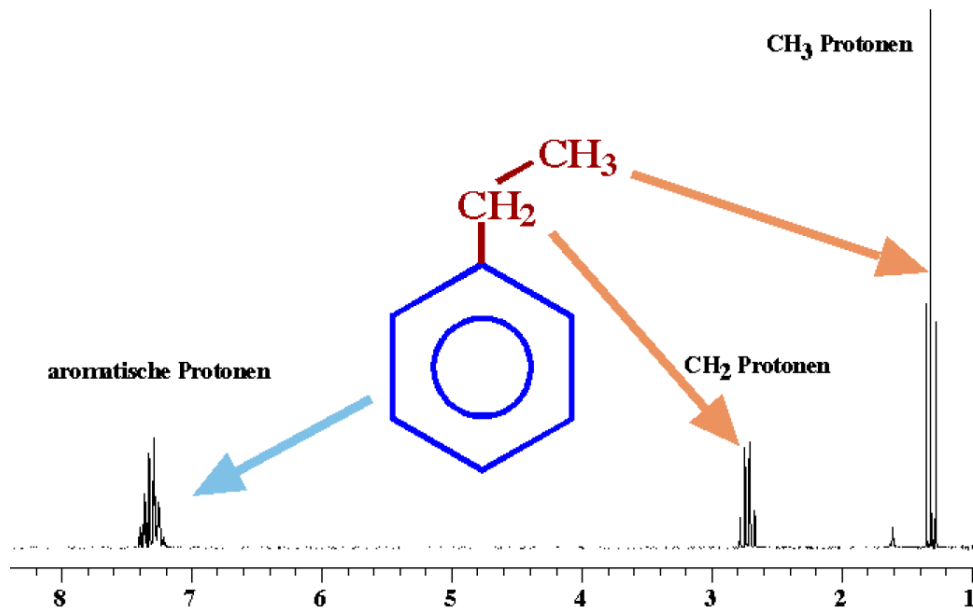


Abbildung 1.6 Protonenspektrum von Ethylbenzol in CDCl_3 . Aufgetragen ist die chemische Verschiebung δ gegen die Signalamplitude (willkürliche Einheiten). Entnommen aus (Suter & Böhmer 2009).

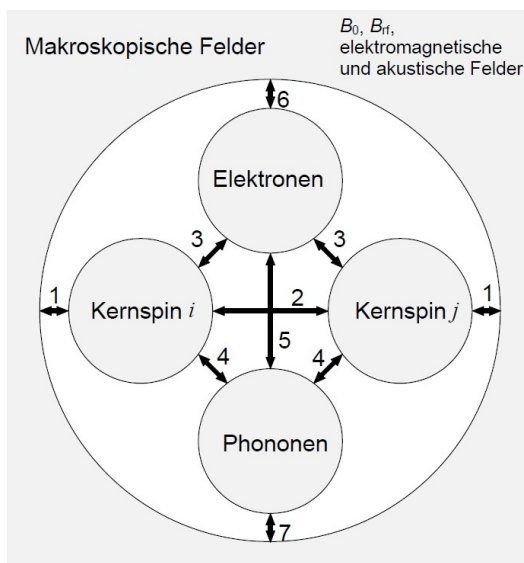


Abb. 1: Die Wechselwirkung (WW) zweier Kernspins i und j untereinander und mit mikroskopischen Teilchen und Feldern (innere WW) sowie mit makroskopischen Feldern (äußere WW). Die Darstellung (M. Mehring) berücksichtigt folgende Wechselwirkungen:

- 1 Zeeman-WW mit äußerem Magnetfeld und HF ($r_f = \text{radio frequency}$)-Wechselwirkung,
- 2 Dipol-Dipol-(direkte Spin-Spin-)WW,
- 3 Kernspin-WW mit paramagnetischen Zentren und für $I > 1/2$ mit Feldgradienten,
- 3-3 Indirekte Spin-Spin-WW (J -Kopplung),
- 3-5 Indirekte Spin-Gitter-WW über Elektronen,
- 3-6 Abschirmung und Polarisierung der Kernspins (chemische Verschiebung, Knight-Shift),
- 4 Direkte Spin-Gitter-WW,
- 4-7 WW mit Phononen, akustische und optische Kernresonanz.

Abbildung 1.7 Darstellung der Wechselwirkungen eines zweikomponentigen Kernspinsystems. Quelle: (Freude 2006).

Der Hamiltonoperator aus Gleichung (1.2.4) ist insofern schwierig auszuwerten, da er eine explizite Zeitabhängigkeit $\cos(\omega t)$ aufweist. Dieses „Problem“ kann man aber durch einen Basiswechsel zum so genannten **rotierenden Koordinatensystem** (engl. rotating frame) lösen. Dazu betrachtet man ein Koordinatensystem, dessen Achsen $\vec{e}'_x, \vec{e}'_y, \vec{e}'_z$ sich in Bezug zu einem festen

Name	Hamiltonoperator	typische Größenordnung
Lineare Wechselwirkungen		
Zeeman ^a	$\mathcal{H}_Z = \hbar B_0 S_z$	$\sim 200 \text{ MHz}$
Chemische Verschiebung	$\mathcal{H}_{cs} = \gamma \hbar \vec{S} \underline{\sigma} B_0$	$\sim 2 \text{ kHz}$
Bilineare Wechselwirkungen		
Dipol-Dipol ^b	$\mathcal{H}_D = \sum_{k<l} \vec{S}_k \underline{D}_{kl} \vec{S}_l$	$\sim 1 \text{ kHz}$
Skalare J-Kopplung ^c	$\mathcal{H}_J = \sum_{k<l} \vec{S}_k \underline{J}_{kl} \vec{S}_l$	$\sim 100 \text{ Hz}$
Weitere		
Quadrupol	$\mathcal{H}_Q = \sum_j \vec{S}_j \underline{Q}_j \vec{S}_j$	$> \mathcal{H}_Z$
Hyperfein ^d	$\mathcal{H}_A = \sum_j \vec{S}_j \underline{A}_j \vec{I}$	$\sim 1 \text{ MHz}$

Tabelle 1.3 Darstellung häufiger Kopplungsmechanismen der Kernspinresonanz, der dazugehörigen Hamiltonoperatoren sowie typischer Größenordnungen eines 1 H-Spektrometers bei $B_0 = 4.7 \text{ T}$. Die Angaben entstammen (Weingarten 2001) sowie (Titman 2009) und (Freude 2006).

^aBenannt nach dem niederländischen Physiker Pieter Zeeman (1865-1943), Nobelpreis für Physik 1902 zusammen mit Hendrik Antoon Lorentz.

^bHier handelt es sich um die „klassische“ direkte Wechselwirkung zweier Dipole. Der Wechselwirkungstensor ist abstands- und richtungsabhängig.

^cDie skalare J-Kopplung zwischen zwei Kernspins wird indirekt über die elektronische Bindung vermittelt. In isotropen Flüssigkeiten ist die Matrix \underline{J}_{kl} zu einer reellen Zahl J_{kl} reduziert.

^dHier sind alle Terme der Wechselwirkung des Kernspins mit dem Elektronenspin zusammengefasst.

Laborsystem $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ zeitabhängig verändern

$$\vec{e}'_x = \vec{e}_x \cos \Phi(t) + \vec{e}_y \sin \Phi(t) \quad (1.2.8a)$$

$$\vec{e}'_y = \vec{e}_y \cos \Phi(t) - \vec{e}_x \sin \Phi(t) \quad (1.2.8b)$$

$$\vec{e}'_z = \vec{e}_z \quad (1.2.8c)$$

Die zeitabhängige Funktion $\Phi(t)$ hat dabei die Gestalt

$$\Phi(t) = \omega_r t + \Phi_r \quad (1.2.9)$$

Diese Form erlaubt es, durch konsequente Anwendung trigonometrischer Additionstheoreme, die unerwünschten Zeitabhängigkeiten im Hamiltonoperator zu annullieren.

Betrachtet man nun einen quantenmechanischen Spinzustand $|\tilde{\psi}\rangle$ in diesem rotierenden Koordinatensystem, vermittelt durch einen Rotationsoperator $R_z(\Phi)$, so gilt

$$|\tilde{\psi}\rangle = R_z(-\Phi) |\psi\rangle \quad (1.2.10)$$

Die Zeitableitung dieses Zustands $|\tilde{\psi}\rangle$ liefert die Schrödingergleichung

$$\frac{d}{dt} |\tilde{\psi}\rangle = -i \tilde{\mathcal{H}} |\tilde{\psi}\rangle \quad (1.2.11)$$

im rotierenden Koordinatensystem, mit dem transformierten Hamiltonoperator

$$\tilde{\mathcal{H}} = R_z(-\Phi) \mathcal{H} R_z(\Phi) - \omega_r S_z \quad (1.2.12)$$

Die in den Kapiteln 2 und 3 betrachteten Hamiltonoperatoren sind alle schon durch eine solche Transformation in das rotierende Koordinatensystem überführt worden.

Mathematisch sind nun die Voraussetzungen für ein NMR Experiment gelegt. Nun möchte ich noch einige allgemeine Aussagen zum experimentellen Aufbau machen. Grundsätzlich lässt sich jedes NMR Spektrometer in drei bis vier Komponenten aufteilen. Für eine schematische Skizze verweise ich auf Abbildung 1.8.

Zuerst benötigt man einen starken Magneten, der das Feld B_0 (Gleichung (1.2.1)) erzeugt. In der Praxis kommen hier sowohl starke Elektromagneten (bis 3 T) als auch supraleitende Magnete (bis 23 T)²².

Die zweite zentrale Komponente ist die Spule, die das Hochfrequenzfeld (1.2.4) erzeugt und danach die Antwort des Systems detektiert. Diese ist daher einerseits mit einer Signalquelle verbunden, andererseits mit einer Empfangseinrichtung. Beide Komponenten werden dabei durch eine Diodenschaltung (Duplexer) voneinander getrennt, so dass die Sendeleistung die Verstärkerkomponenten des Empfängers nicht zerstört. Innerhalb der zweiten Spule befindet sich dann auch die Probe, die untersucht wird.

Jede der angesprochenen Komponenten bietet eine Vielzahl an Optimierungsmöglichkeiten und muss an das jeweilige Experiment angepasst werden. Eine vollständige Betrachtung ist daher an dieser Stelle weder möglich noch sinnvoll, schließlich handelt es sich um eine theoretische Arbeit, die allein die (idealisierte) Pulsform adressiert.

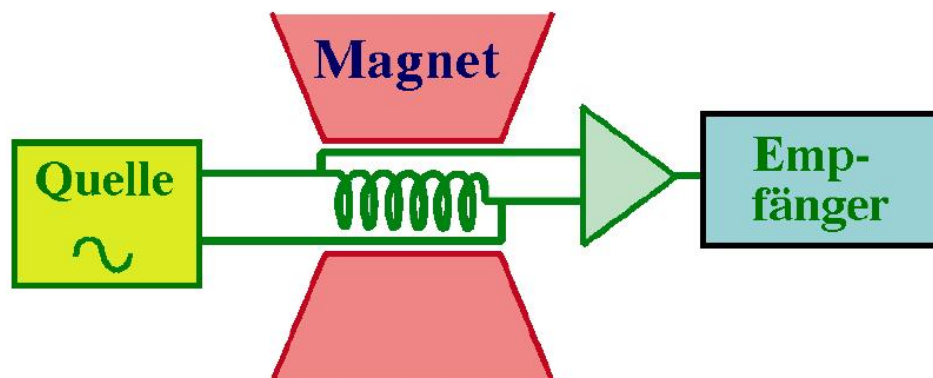


Abbildung 1.8 Prinzipieller Aufbau eines Spektrometers. Aus (Suter & Böhmer 2009).

1.2.2. Quantenpunkte

Neben Kernspinsystemen gibt es noch eine Vielzahl anderer Systeme, die Pulsformungstechniken einsetzen können. Beispielsweise sind so genannte Quantenpunktstrukturen von Interesse, da auch diese sich zur Quanteninformationsverarbeitung einsetzen lassen.

Quantenpunkte gehören zur Klasse der niederdimensionalen Halbleiter. Diese Halbleiter (z.B. GaAs oder InSb) werden durch spezielle Techniken in ihren räumlichen Abmessungen im Nanometerbereich begrenzt, so dass sich besondere Eigenschaften hinsichtlich ihrer elektronischen Wellenfunktionen ausbilden. Man unterscheidet dabei:

Einschränkung	Name
keine	Volumenhalbleiter
eine Dimension	Grenzflächen

²²siehe <http://www.bruker-biospin.com/av1000-dir.html>

Einschränkung	Name
zwei Dimensionen	Quantendrähte
drei Dimensionen	Quantenpunkte.

Diese Strukturen werden über verschiedene Methoden erzeugt, grob kann man diese wie folgt klassifizieren:

- Nass-chemische Methoden: Das Material liegt in Lösung vor; anschließend verdampft man das Lösungsmittel.
- Molekularstrahlepitaxie: Das Material wird auf ein Substrat aufgebracht, durch Wechselwirkung mit der Substratoberfläche bilden sich (selbstorganisiert) Strukturen aus.
- Lithographie: Durch Behandlung einer Oberfläche mittels Elektronenstrahlen, Rasterkraftmikroskopie und anschließender chemischer Ätzung kann man einzelne Inseln erzeugen.

Insbesondere die Lithographie eignet sich aber nur bedingt zur Herstellung von Quantenpunkten, da hier viele Störstellen im Substrat erzeugt werden und die erzeugten Quantenpunkte nicht hinreichend klein genug sind. Für eine umfassendere Übersicht insbesondere der Selbstorganisation (Stranski²³–Krastanov²⁴ Wachstum) verweise ich auf (Rastelli et al. 2009).

Abbildung 1.9a zeigt, welchen direkten Einfluss die räumlichen Dimensionen auf die optischen Eigenschaften von Quantenpunktstrukturen haben.

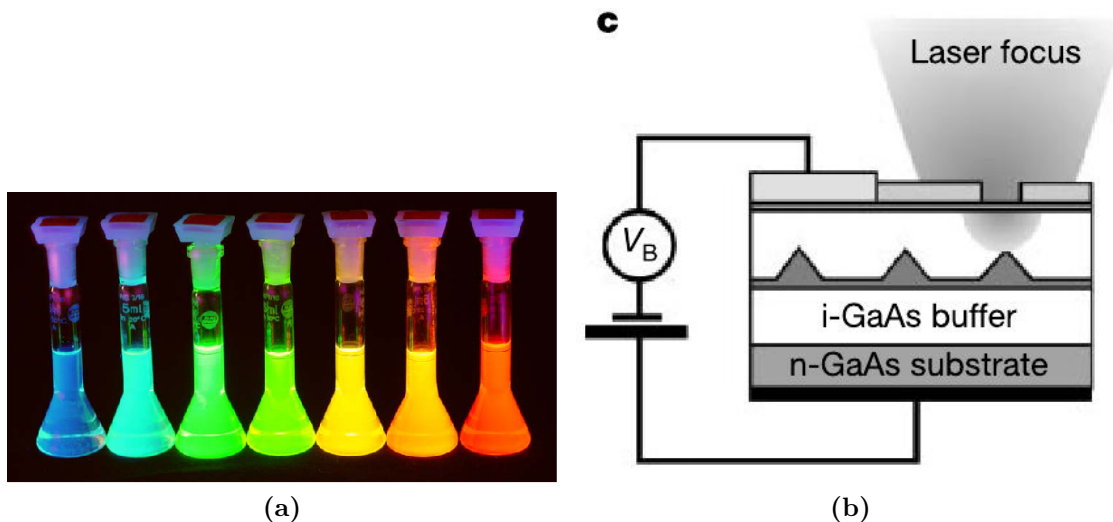


Abbildung 1.9 (a) zeigt CdSe-Quantenpunkte in Lösung. Durch die unterschiedliche Dimensionierung verändern sich optische Eigenschaften. Quelle <http://www.nanopicoftheday.org/2003Pics/QDRainbow.htm>. (b) skizziert die Spannungsmessung an einem Quantenpunkt. Quelle: (Zrenner et al. 2002)

Die Abmessungen eines Quantenpunktes liegen im Bereich der thermischen de-Broglie-Wellenlänge²⁵ eines Elektrons bei Raumtemperatur

²³Ivan Nikolov Stranski (1897-1979), Bulgarischer Physikochemiker

²⁴Lyubomir Krastanov (1907-1977), Bulgarischer Meteorologe, Chemiker & Geophysiker

²⁵Louis de Broglie (1892-1987), französischer Physiker, Nobelpreis 1929.

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e^*k_B T}} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{\sqrt{2 \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \times 300 \text{ K}}} \approx 7.6 \text{ nm} . \quad (1.2.13)$$

In dieser Rechnung wurde, da es sich ja nur um eine Abschätzung handelt, statt der effektiven Elektronenmasse m_e^* die Ruhemasse eines Elektrons eingesetzt.

Diese Abmessungen bedingen den Übergang vom kontinuierlichen elektronischen Bändermodell zu diskreten Energieniveaus, auf denen – je nach Dotierung – maximal zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin sitzen.

Die Anregung eines Elektrons aus dem Valenzband²⁶ in das Leitungsband erzeugt eine Fehlstelle (ein Loch) im Valenzband. Besteht ein gebundener Zustand zwischen Fehlstelle und Anregung, spricht man von einem Exziton.

An diesen Systemen können verschiedene Messungen durchgeführt werden. Unter anderem sind auch hier Messungen an Kernspins (bzw. Elektronenspins oder Bahnspins) mit den im vorigen Kapitel (1.2.1) beschriebenen Techniken möglich. Typischerweise bedient man sich des Elektronenspins

$$\gamma(e^-) = 1.760\,859\,708 \times 10^{11} \text{ s}^{-1} \text{ T}^{-1} . \quad (1.2.14)$$

Dabei wird das ankoppelnde Bad oft durch Kernspins gebildet.

Andererseits bildet auch das Exziton selbst ein Qubit, so lange man sich in guter Näherung auf zwei Energieniveaus beschränken darf. Diese Forderung wird insbesondere in niedermensionalen Halbleitermaterialien gut erfüllt, da das Exziton hier durch entsprechenden räumlichen Einschluss nur zwei Energiezustände einnehmen kann. Diese exzitonischen Qubits lassen sich mit Hilfe gepulster zirkular-polarisierter Laser (meist im Terahertzbereich) anregen. Die Auswirkung dieser Pulse wird anschließend entweder durch einen zweiten Laser – den so genannten probe-Laser – oder durch eine Spannungs-/Strommessung (s. Abbildung 1.9b am Quantenpunkt abgefragt).

Den meisten dieser Materialien ist gemein, dass sie empfindlich auf Temperatureinflüsse und/oder externe Magnetfelder reagieren. Das Relaxationsverhalten/die Dephasierung eines solchen Systems aufgrund dieser Störungen ist aber dennoch kein unlösbares Problem im Sinne der Quanteninformationsverarbeitung, wie in (Greilich et al. 2006) gezeigt wird.

Leider muss aber auch gesagt werden, dass die Technik bislang noch nicht in der Lage ist, die im Kapitel 2 vorgeschlagenen Pulse hinreichend gut genug experimentell zu realisieren. Es existieren zwar Pulsformer für optische Pulse, diese sind aber noch nicht so weit ausgereift, als dass sie mit der Kernspinresonanz konkurrieren können.

1.3. Bisherige Arbeiten

1.3.1. Pulssequenzen

Aufgrund der Vielzahl an verschiedenen Systemen und Kopplungsmechanismen existiert auch eine große Masse an Lösungsvorschlägen, Dekohärenz zu unterdrücken.

Die einfachste Variante besteht derzeit darin, alle Schaltvorgänge eines möglichen Quantenrechners so schnell ablaufen zu lassen, dass die Kohärenzzeiten weit größer als die angesprochenen Schaltzeiten sind. Ein solches Vorgehen ist aber nur bedingt möglich, da die experimentelle Schaltungs- und Regeltechnik nicht beliebig schnell operieren kann.

²⁶Korrekterweise müsste man von Valenzniveau sprechen, was aber unüblich ist.

Ein anderer Weg ist die so genannte **Quantenfehlerkorrektur**. Die meisten dieser Verfahren basieren darauf, mit einer Vielzahl an Zuständen zu arbeiten und so – durch redundante Information – Fehler aktiv zu korrigieren. Der Preis dieser Vorgehensweise besteht darin, dass viele Zustände adressierbar sein müssen und diese gegebenenfalls austauschbar sein müssen. Oder aber, dass am Ende der Rechnung neben den immer vorhandenen quantenmechanischen Erwartungswerten zusätzliche klassische Mittelwerte zur Ergebnisermittlung betrachtet werden müssen. Zusätzlich bieten solche Verfahren gerade im Bereich der Quantenkommunikation potentiellen Angreifern Möglichkeiten, sichere Kommunikationsprotokolle zu infiltrieren.

Im Fall der Kernspinresonanz und anderer Realisationen, die aktive Gatter benutzen, ist natürlich auch die Optimierung der verwendeten externen Kontrollen (Pulse) eine effektive Möglichkeit, Dekohärenzen zu unterdrücken. An diesem Punkt setzt diese Arbeit an.

Man kann aber davon ausgehen, dass ein voll funktionsfähiger Quantenrechner eine Mischung der angesprochenen und anderer Methoden nutzen wird, da eine Methode allein nicht ausreichen wird, alle Probleme zu beseitigen.

Möchte man die Pulse dahingehend optimieren, die Kohärenz zu verlängern, so sind schon lange Zeit so genannte Pulssequenzen, die eben dieses Ziel vor Augen haben, bekannt. Hier geht man davon aus, dass man – mehr oder weniger – ideale Pulse²⁷ zur Verfügung hat und diese so zeitlich aufeinander folgen lässt, dass mögliche Dekohärenzen (insbesondere Dephasierungserscheinungen) verschwinden, bzw. sich gegenseitig annihilieren.

Eine der ersten Vorschläge einer solchen „Sequenz“ stellt das so genannte **Hahn²⁸–Echo** (Hahn 1950) dar. Der zeitliche Ablauf dieses Mehrpulsexperiments ist in Abbildung 1.10 gezeigt. Der Anfang der Sequenz wird durch einen (idealen) 90° -Puls ($\pi/2$) um die y -Achse eingeleitet. Dadurch wird die Gleichgewichtsmagnetisierung von der z - auf die x -Achse rotiert. Nun präzedieren die einzelnen Spins mit ihrer jeweiligen Resonanzfrequenz. Dabei haben aber auch chemisch identische Spins aufgrund von Magnetfeldinhomogenitäten oder anderen unbekanntem Kopplungen abweichende Resonanzfrequenzen, so dass man bei Messung der x -Magnetisierung mit der Zeit ein exponentiell abfallendes Signal erhält. In Abbildung 1.10 ist dies durch den blauen und roten Pfeil dargestellt, die sich unterschiedlich in der xy -Ebene bewegen.

Statt einer direkten Messung erfolgt in der Hahn-Sequenz nach dem ersten 90° -Puls eine Wartezeit, in der die Spins – von außen unbeeinflusst²⁹ – präzedieren. Nach einer gewissen Zeit T erfolgt ein Puls um die x -Achse um 180° (π). Auf diese Weise kehrt sich der „Drehsinn“ der Spinvektoren um, so dass sie nun wieder zurück zur x -Achse laufen.

Wartet man nun wieder die Zeitspanne T ab, so erhält man ein verstärktes Signal am Ende der Wartezeit. Das Hahn-Echo eignet sich daher zur Refokussierung von Wechselwirkungen wie der chemischen Verschiebung oder der heteronuklearen Dipol-Dipol-Wechselwirkung. Für eine ausführlichere Behandlung des Hahn-Echos verweise ich auf (Suter & Böhmer 2009).

Knapp zwei Jahre nach Veröffentlichung des Hahn-Echos erfolgte die Erweiterung dieser Sequenz auf eine Mehrpulssequenz durch Carr und Purcell (Carr & Purcell 1954). Dieses Verfahren wurde vier Jahre später (1958) durch Meiboom und Gill in leicht veränderter Form nochmals formuliert (Meiboom & Gill 1958). Daher wird diese Sequenz als Carr-Purcell-Meiboom-Gill-Sequenz (CPMG) bezeichnet. Eine Skizze dieser Sequenz ist in Abbildung 1.11 gezeigt. Der Unterschied zwischen Carr-Purcell und Meiboom-Gill besteht in der Phasenverschiebung von 90° zwischen dem initialen $\pi/2$ - und dem folgenden π -Puls³⁰. Dies hat zur Folge, dass sich CPMG robuster hinsichtlich Abweichungen der einzelnen Pulse vom Drehwinkel π verhält.

²⁷ Also solche Pulse, die instantan auf genau eine Spinspezies wirken.

²⁸ Erwin Hahn (1921 - heute), U.S. amerikanischer Physiker

²⁹ Man spricht hier von „Freier Zeitentwicklung“ oder „Free Induction Decay“ (FID).

³⁰ Siehe (Slichter 1992, Kapitel 8.3).

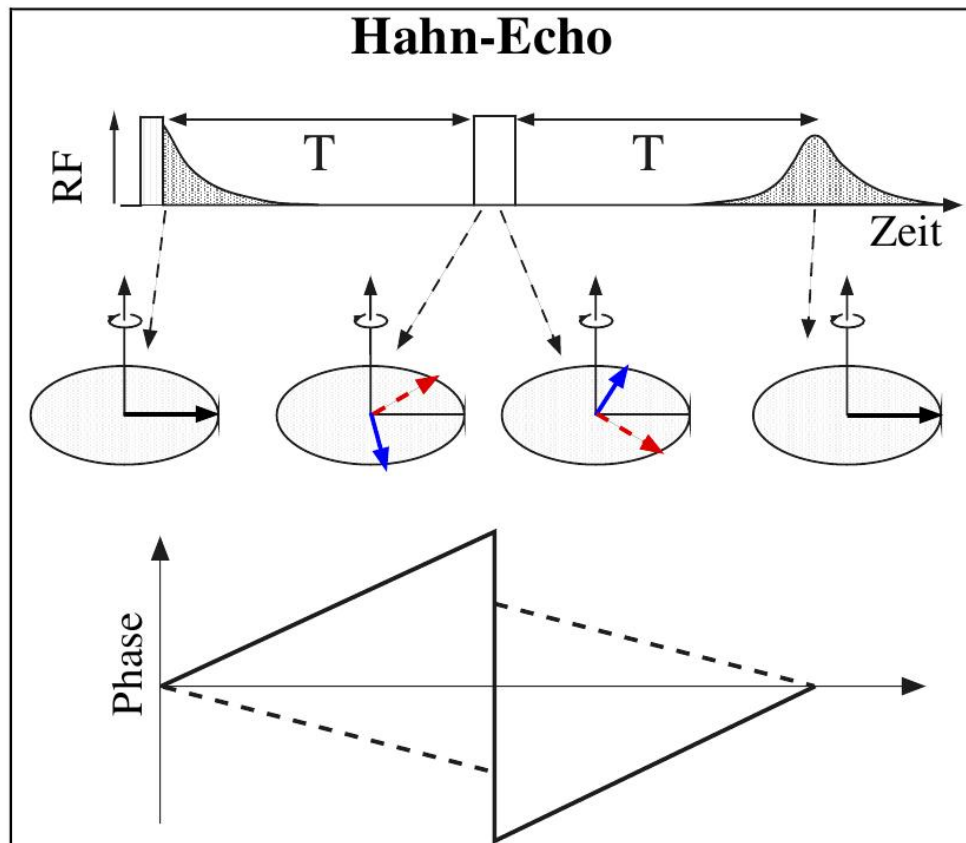


Abbildung 1.10 Schematische Darstellung des Hahn-Echos. Oben ist der zeitliche Verlauf der Pulse nebst FID gezeigt, darunter befindet sich die Darstellung zweier Spins im rotierten Koordinatensystem. Unten ist die Phasenbeziehung der beiden dargestellten Spins wiedergegeben. (Suter & Böhmer 2009)

An dieser Stelle ist die Forschung nicht stehengeblieben. Allein durch wiederholtes Anwenden der beiden vorgestellten Sequenzen ergibt sich eine Vielzahl an Variations- und Anwendungsmöglichkeiten. Neben der analytischen Berechnung von Sequenzschemata existieren auch numerische Verfahren, eine Sequenz bei gegebenem Modell zu finden. Als Beispiel sei hier (Stadelhofer 2006) genannt. Hier wurden genetische Algorithmen genutzt, um Pulssequenzen zu generieren. Aber auch darüber hinaus gibt es eine Vielzahl an Verfahren, auf die ich hier aber nicht im Einzelnen eingehen kann.

Allerdings will ich dennoch auf jüngste Dortmunder Entwicklungen hinweisen. Nämlich die so genannten Uhrig Dynamical Decoupling- (UDD) Concatenated-UDD- (CUDD) Sequenzen. Diese wurden in (Uhrig 2007) respektive (Uhrig 2009) vorgestellt und erfahren seitdem große Beachtung. Erst kürzlich wurde diese Sequenz erfolgreich im Bereich der bildgebenden Kernspinresonanz³¹ eingesetzt (Jenista et al. 2009).

Kerngedanke ist, die führenden Ordnungen einer Zeitentwicklung zu unterdrücken. Dazu wird eine Sequenz von n idealen Pulsen verwendet; die zu den Zeitpunkten

$$\delta_j = t \sin^2 \left(\frac{\pi j}{2(n+1)} \right). \quad (1.3.1)$$

³¹Magnetic Resonance Tomography (MRT), Kernspintomographie

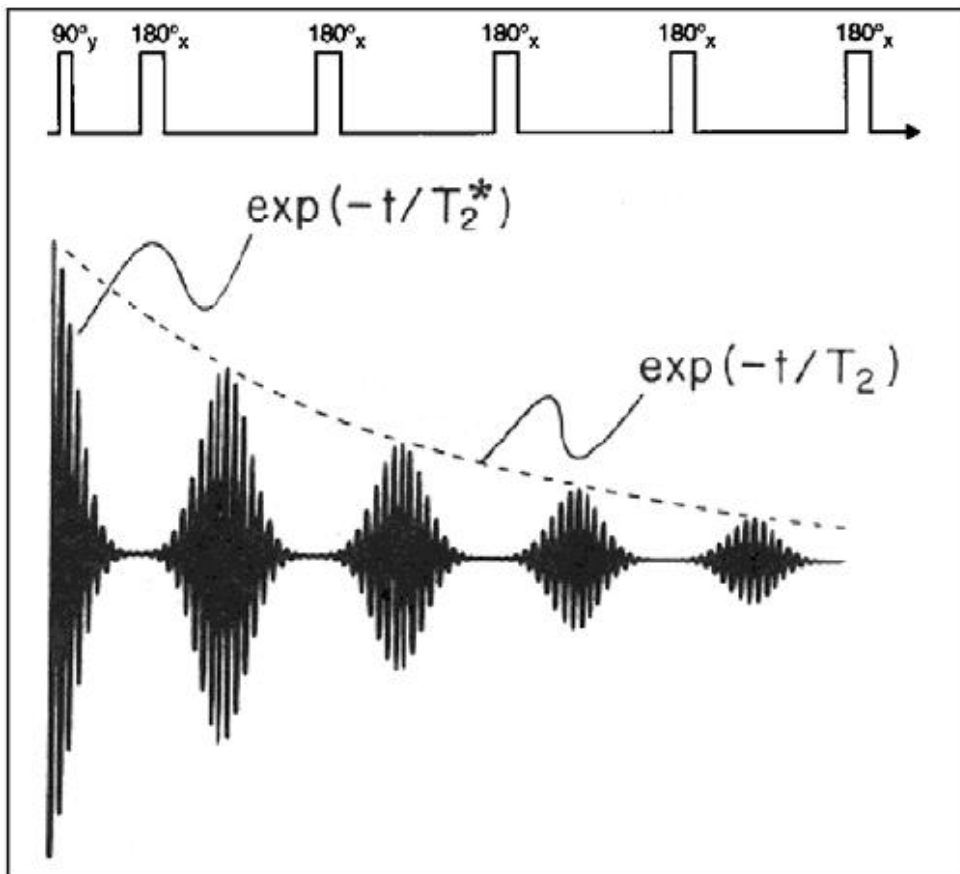


Abbildung 1.11 Skizze der CPMG-Sequenz (oben) und des zugehörigen Signalverlaufs (unten). Aus (Suter & Böhmer 2009).

appliziert werden. Die Zeit t bezeichnet dabei die Gesamtdauer der Sequenz und j ist der Pulsindex $j \in 1 \dots n$). Anders als CPMG nutzt man hier also unterschiedliche Zeitabstände.

Im Fall der zusammengesetzten CUDD Variante wird diese Sequenz weiter verschachtelt und die Zeiten t erhalten einen zusätzlichen Index. Um eine Verbesserung bis zur Ordnung $\mathcal{O}(t^l)$ zu erzielen, werden 2^l Pulse benötigt. Seit geraumer Zeit wurde dieses Verhalten durch „Quadratic DD“ (QDD) – welche lediglich eine quadratisch wachsende Zahl an Pulsen verwendet – verbessert, wie in (West et al. 2010) numerisch und in (Pasini & Uhrig 2010) analytisch gezeigt wird.

Weitere Details zu diesen Sequenzen sprengen den Rahmen dieser Arbeit, daher beschränke ich mich auf die genannten Referenzen.

Bisher wurden aber nur wenige Schritte unternommen, den Einfluss eines Bades auf die Wirkung eines Pulses zu untersuchen. D.h. es werden nur Sequenzen zusammengesetzt aus idealen Pulsen betrachtet. Ideale Pulse meinen solche Pulse, deren Wirkung instantan ist. Reale experimentelle Pulse besitzen jedoch eine gewisse Zeitdauer und sind in ihrer Amplitude beschränkt (s. Abbildung 2.1). Auch wenn noch viele andere Störeinflüsse bei realen Pulsen existieren, sollen diese Größen (Dauer und Amplitude) im Vordergrund stehen.

Der naheliegende Schritt, statt idealer Pulse solche mit endlicher Dauer zu nutzen, wird bereits angegangen. Als Beispiel sei hier (Uhrig & Pasini 2010) genannt, wo die im folgenden diskutierten Pulse (Kapitel 2.1 und 2.2) zu einer Sequenz aus realen Pulsen (RUDD) kombiniert und eingehender analysiert werden.

1.3.2. Pulsformung

Inhalt dieser Arbeit ist die Analyse und numerische Prüfung optimierter Pulse. Die genauen Details werde ich in den folgenden Kapiteln ³² ausführen.

An dieser Stelle möchte ich kurz auf Arbeiten anderer Gruppen eingehen. Die Idee, Kernspinsysteme als Quantenrechner zu nutzen, ist nicht neu. Einige Methoden zur Unterdrückung von Dekohärenzen, wie zum Beispiel die Verwendung von Pulssequenzen (Abschnitt 1.3.1), wurden bereits angesprochen. Aber auch die Pulse selber bedürfen Anpassungen, um der jeweiligen experimentellen Situation gerecht zu werden. Spätestens bei Anwendungen der Quanteninformationsverarbeitung werden einfache Kontrollmechanismen nur in wenigen Fällen ausreichen, um zum Beispiel Dekohärenz hinreichend gut genug zu unterdrücken.

Als Vertreter der numerischen Verfahren zur Pulsoptimierung möchte ich (Fortunato et al. 2002) nennen. Hier wurden Modelle zweier Verbindungen (Alanin und Krotonsäure) anhand gemessener Kopplungskonstanten aufgestellt. Die Pulsoptimierung wurde mit Hilfe einer Kostenfunktion (Fidelity)

$$F = \left\langle \frac{\text{Trace } \rho_{\text{th}} \rho_{\text{out}}}{\sqrt{\text{Trace } \rho_{\text{th}}^2 \rho_{\text{in}}^2}} \right\rangle \quad (1.3.2)$$

numerisch durchgeführt³³. Ein Ergebnis dieser Optimierung ist in Abbildung 1.12 gezeigt.

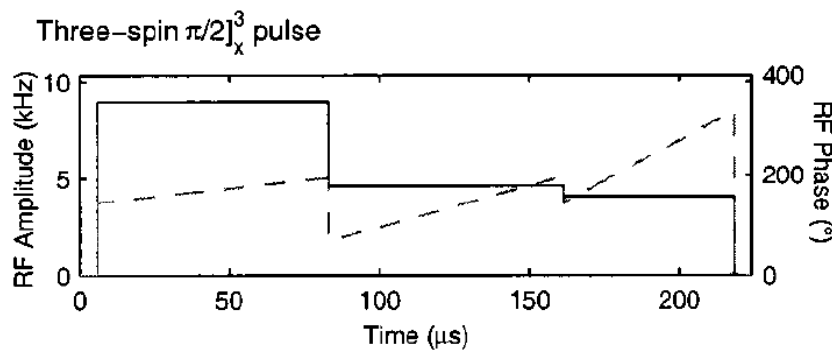


Abbildung 1.12 Abbildung aus (Fortunato et al. 2002). Gezeigt ist der zeitliche Verlauf eines für drei Spins (Alanin) optimierten $\pi/2$ Pulses (durchgezogene Linie) sowie die Phasenbeziehung der angelegten Felder (gestrichelte Linie).

Kennt man die Kopplungsparameter eines Systems und übersteigt dessen Komplexität nicht die Grenzen des Berechenbaren, so erzielt man auf diese Weise gute Resultate. Allerdings sind diese Ergebnisse nur für eine kleine Klasse von Systemen anwendbar, da die Pulse sehr individuell generiert wurden und man zudem nur wenige Informationen über die Zusammenhänge zwischen optimierten Puls und Probensystem erhält.

Neben numerischen Verfahren existieren auch analytische Rechnungen, Pulse für bestimmte Aufgaben und Modellsysteme zu optimieren. Hervorheben möchte ich die Arbeiten von Cummins et al. (Cummins & Jones 2000; Cummins et al. 2003). Hier wurden Methoden – wie die Magnus-Entwicklung – verwandt, die auch in in den Abschnitten 2.1 und 2.2 zur Anwendung kommen.

Zudem zeigte sich, dass die dort gefundenen CORPSE-/SCORPSE-Pulse auch Lösungen der von uns aufgestellten Integralgleichungen (2.1.40) und (2.2.38) darstellen.

³²Insbesondere Kapitel 2.1 und 2.2

³³ ρ_{in} bezeichnet den Dichteoperator eines Anfangszustands, ρ_{out} den des Endzustands und ρ_{th} den des theoretisch erwarteten Endzustands.

Allerdings betrachten Cummins et al. sowohl eine andere Ziel- als auch Modellvorgabe als die unsere. Dort wurde nämlich das Ziel der vollen Entkopplung des Spins von seiner Umgebung

$$U_p(\tau_p, 0) = P_\theta \quad (1.3.3)$$

angestrebt. $U_p(\tau_p, 0)$ beschreibt die Zeitentwicklung des Systems unter Wirkung des Pulses (im Zeitraum $0 \dots \tau_p$, die bei Cummins et al. dem idealen Puls mit Drehwinkel θ entsprechen soll. Unser Anspruch hingegen ist in Abschnitt 2.1 durch

$$U_p(\tau_p, 0) = e^{-i(\tau_p - \tau_s)\mathcal{H}} P_\theta e^{-i\tau_s\mathcal{H}} \quad (1.3.4a)$$

bzw. in Abschnitt 2.2 durch

$$U_p(\tau_p, 0) = e^{-i\tau_p\mathcal{H}_b} P_\theta \quad (1.3.4b)$$

charakterisiert. Die Größe τ_s bezeichnet den „Schwerpunkt“ eines Pulses, die Hamiltonoperatoren \mathcal{H} und \mathcal{H}_b repräsentieren den Hamiltonoperator des Gesamtsystems bzw. des Bades.

Darüberhinaus unterscheiden sich auch die betrachteten Modelle, während Cummins et al. hauptsächlich Modelle ohne eigenständige Baddynamik betrachten, ist eben dies wesentlicher Bestandteil unserer Analysen.

2. Analytische Resultate

2.1. Pulsoptimierung I

Wichtige Arbeiten

Pasini et al. 2008

PASINI, S. ; FISCHER, T. ; KARBACH, P. ; UHRIG, G. S.: Optimization of short coherent control pulses. In: **Phys. Rev. A** 77 (2008), Nr. 3, 032315. – DOI 10.1103/PhysRevA.77.032315

2.1.1. Einleitung

The coherent control of a small quantum system is considered. For a two level system coupled to an arbitrary bath we consider a pulse of finite duration. We derive the leading and next-leading order corrections to the evolution due to the noncommutation of the pulse and the bath Hamiltonian. The conditions are computed that make the leading corrections vanish. The pulse shapes optimized in this way are given for π and $\pi/2$ pulses.

Abstract von Pasini et al. (2008).

Wie man der englischen Zusammenfassung entnehmen kann, wollen wir die Kopplung eines Zweiniveausystems (dargestellt durch einen Spin- $1/2$) an ein beliebiges Bad untersuchen. Wir betrachten einen Hamiltonoperator der Art

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_b + \lambda A \sigma_z . \quad (2.1.1)$$

A und \mathcal{H}_b enthalten dabei nur Operatoren, die auf dem Hilbertraum des Bades operieren, oder anders ausgedrückt

$$[A, \sigma_i] = [\mathcal{H}_b, \sigma_i] = 0 \quad i \in \{x, y, z\} . \quad (2.1.2)$$

Als interne Energieeinheit des Bades definieren wir die skalare Größe ω_b . Dieses Modell besitzt keine Spinflipsterme (σ^+ oder σ^- bzw. σ_x oder σ_y) daher kommt es in dieser Betrachtung zu keiner Spin-Gitter-Relaxation (die Relaxationszeit $T_1 \rightarrow \infty$)¹. Exemplarisch sei hier ein Spin-Boson-Modell angegeben

$$\mathcal{H} = \sum_i \omega_i b_i^\dagger b_i + \sigma_z \sum_i \lambda_i (b_i^\dagger + b_i) . \quad (2.1.3)$$

Dabei würden die Parameter zu $\lambda = \max_i \lambda_i$, $A = \sum_i (\lambda_i/\lambda) (b_i^\dagger + b_i)$ und $\omega_b = \max_i \omega_i$ bestimmt.

Das externe Kontrollfeld (Puls) wird über

$$\mathcal{H}_0 = v(t) \sigma_y \quad (2.1.4)$$

¹Man bedenke aber, dass der Begriff der Relaxation/Dephasierung vom jeweiligen Kontext abhängt. Das heißt zum Beispiel, dass in manchem Umfeld auch Pulseffekte zur Dekohärenz gezählt werden.

dargestellt. Hierbei beschreibt die skalare Funktion $v(t)$ die Zeitabhängigkeit des Pulshamiltonoperators. Die Kopplung an das Feld geschieht in y -Richtung des Zentralspins. Als vereinfachende Annahme wird davon ausgegangen, dass die Badspins nicht direkt durch den Puls beeinflusst werden. Eine Verallgemeinerung der Rechnungen hinsichtlich einer Ankopplung in der Art

$$\mathcal{H}_0 = \vec{v}(t)\vec{\sigma} \quad (2.1.5)$$

findet man in Referenz (Pasini & Uhrig 2008). Dort werden ähnliche Betrachtungen wie im Folgenden gemacht. Da diese Verallgemeinerung aber hier nicht numerisch ausgewertet wird, beschränke ich mich in meiner Beschreibung auf den vereinfachten Fall (2.1.1).

In (Fauseweh et al. 2011) werden diese Modelle um frequenzmodulierte Pulse und zeitabhängiges Bad erweitert. Auch hier werden π - und $\pi/2$ -Pulse, die die erste und zweite Ordnung in der Pulsdauer optimieren, gefunden.

Die Zeitentwicklung des Systems für die Gesamtdauer des Pulses (von $t = 0$ bis $t = \tau_p$) wird durch

$$U_p(\tau_p, 0) = \mathcal{T} \left[\exp \left(-i \int_0^{\tau_p} \mathcal{H}_0(t) dt - i \mathcal{H}_{\tau_p} \right) \right] \quad (2.1.6)$$

beschrieben. Auf die Bedeutung des Zeitordnungsoperators \mathcal{T} wird in Anhang A.1.1 genauer eingegangen. Da $[\mathcal{H}, \mathcal{H}_b] \neq 0$ gilt, ist (2.1.6) nicht ohne weiteres auswertbar.

Weiterhin definiert man die Stammfunktion der Pulsamplitude als

$$\varphi(t) := \int_{\tau_s}^t v(t') dt' . \quad (2.1.7)$$

Der noch unbestimmte Integrationszeitpunkt $\tau_s \in [0, \tau_p]$ wird der Zeitpunkt sein, den der ideale δ -artige Puls hat.

Den gewünschten Drehwinkel θ erhält man als das Doppelte der Fläche der Pulsamplitude², d.h.

$$\theta := 2\Phi = 2(\varphi(\tau_p) - \varphi(0)) = \psi(\tau_p) - \psi(0) . \quad (2.1.8)$$

Hierbei wurde zur Vereinfachung $\psi(t) = 2\varphi(t)$ eingeführt. Im später betrachteten Grenzfall $\tau_p \rightarrow 0$ muss der Drehwinkel und somit die Fläche konstant bleiben.

Nun gilt es, die Funktion $v(t)$ so zu bestimmen, dass im Rahmen der – später erfolgenden – Näherungen der reale Puls einem idealen Puls zum Zeitpunkt τ_s entspricht.

2.1.2. Allgemeine Formeln

Während sich viele Publikationen (wie z.B. (Cummins & Jones 2000)) der vollen Unterdrückung der Dekohärenz unter Wirkung eines Pulses widmen, ist unser Ziel moderater gefasst. Uns geht es darum, Pulse zu formulieren, die einen idealen instantanen Puls zu einem bestimmten Zeitpunkt τ_s umgeben von freier Zeitentwicklung des vollen Systems darstellen. Anders ausgedrückt, verfolgen wir die Entkopplung des Pulses und des Spinsystems.

Wir gehen davon aus, dass dieses Ansinnen realistischer umzusetzen ist als eine volle Entkopplung. Insbesondere, wenn allgemeine dynamische Badssysteme auftreten. Sollte dennoch eine volle Entkopplung erforderlich sein, kann dies ggf. durch Pulssequenzen (siehe Abschnitt 1.3.1) erreicht werden.

Mathematisch formuliert ergibt sich daher das folgende Ziel. Die idealisierte Zeitpropagation $U_p(\tau_p, 0)$ wird in drei Bestandteile zerlegt. Es beginnt mit der freien Evolution im Zeitraum

²Der Faktor 2 ist nötig, da später mit Paulimatrizen und nicht mit Spinoperatoren gearbeitet wird..

$[0, \tau_s]$. Es folgt zum Zeitpunkt τ_s ein idealer Puls vom Drehwinkel θ . Abschließend erfolgt eine weitere freie Entwicklung³ im Zeitraum $[\tau_s, \tau_p]$. In Formeln ausgedrückt bedeutet dies

$$U_p(\tau_p, 0) \approx \exp(-i(\tau_p - \tau_s)\mathcal{H}) P_\theta \exp(-i\tau_s\mathcal{H}) . \quad (2.1.9)$$

Um diesem Ziel nahezukommen, betrachten wir die Zeitpropagation in zwei Intervallen (vor und nach τ_s).

$$U_p(\tau_p, 0) = u_p(\tau_p, \tau_s)u_p(\tau_s, 0) \quad (2.1.10)$$

Daraus begründen sich die Ansätze der beiden Teilpropagatoren $u_p(\tau_p, \tau_s)$ und $u_p(\tau_s, 0)$

$$u_p(\tau_p, \tau_s) = \exp(-i(\tau_p - \tau_s)\mathcal{H}) \exp\left(-i\sigma_y \int_{\tau_s}^{\tau_p} v(t) dt\right) U_2(\tau_p, \tau_s) \quad (2.1.11a)$$

$$u_p(\tau_s, 0) = U_1(\tau_s, 0) \exp\left(-i\sigma_y \int_0^{\tau_s} v(t) dt\right) \exp(-i\tau_s\mathcal{H}) . \quad (2.1.11b)$$

Die beiden bislang unbekanntenen Operatoren $U_1(\tau_s, 0)$ und $U_2(\tau_s, \tau_p)$ stellen Korrekturen dar, die nötig sind, da allgemein $[\mathcal{H}, \mathcal{H}_0] \neq 0$ gilt. Aber man wird versuchen, diese Operatoren durch geschickte Wahl der Pulsparameter an den Einheitsoperator $\mathbb{1}$ anzugleichen. Gelingt es z.B.

$$U_F := U_2(\tau_p, \tau_s)U_1(\tau_s, 0) = \mathbb{1} + \mathcal{O}(\tau_p^2) \quad (2.1.12)$$

zu erreichen, so hätte man in linearer Ordnung in τ_p

$$U_p(\tau_p, 0) = \exp(-i(\tau_p - \tau_s)\mathcal{H}) \exp\left(-i\sigma_y \int_0^{\tau_p} v(t) dt\right) \exp(-i\tau_s\mathcal{H}) \quad (2.1.13)$$

erzielt, was genau dem gewünschten Ziel entspricht, nämlich der Entkopplung von Puls und System.

Nun aber wieder zurück zur Berechnung der unitären Korrekturen U_1 und U_2 . Beide Funktionen werden mit Hilfe der Schrödingergleichung bestimmt. Betrachten wir zuerst U_2 zu einem Zeitpunkt τ , der im Intervall $[\tau_s, \tau_p]$ liegt

$$U_p(\tau, \tau_s) = e^{-i\Delta\tau\mathcal{H}} \exp\left(-i \int_{\tau_s}^{\tau} \mathcal{H}_0 dt\right) U_2(\tau, \tau_s) . \quad (2.1.14)$$

Hier wurde die abkürzende Schreibweise

$$\Delta x := x - \tau_s \quad (2.1.15)$$

benutzt.

Die Schrödingergleichung

$$i \partial_\tau U_p(\tau, \tau_s) = [\mathcal{H}_0(\tau) + \mathcal{H}] U_p(\tau, \tau_s) \quad (2.1.16)$$

liefert nach Einsetzen von (2.1.14)

$$\begin{aligned} & [\mathcal{H} e^{-i\Delta\tau\mathcal{H}} + e^{-i\Delta\tau\mathcal{H}} \mathcal{H}_0] \exp\left(-i \int_{\tau_s}^{\tau} \mathcal{H}_0(t) dt\right) U_2(\tau, \tau_s) \\ & + i e^{-i\Delta\tau\mathcal{H}} \exp\left(-i \int_{\tau_s}^{\tau} \mathcal{H}_0(t) dt\right) \partial_\tau U_2(\tau, \tau_s) \\ & = [\mathcal{H}_0(\tau) + \mathcal{H}] e^{-i\Delta\tau\mathcal{H}} \exp\left(-i \int_{\tau_s}^{\tau} \mathcal{H}_0(t) dt\right) U_2(\tau, \tau_s) . \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

³Mit freier Entwicklung ist hier gemeint, dass sich das System nur unter \mathcal{H} zeitlich entwickelt.

Die Terme proportional zu \mathcal{H} heben sich gegeneinander weg, so dass

$$i \partial_\tau U_2(\tau, \tau_s) = [\tilde{\mathcal{H}}_0(\tau) - \mathcal{H}_0(\tau)] U_2(\tau, \tau_s) \quad (2.1.18)$$

mit

$$\tilde{\mathcal{H}}_0(\tau) := \exp\left(i \int_{\tau_s}^\tau \mathcal{H}_0(t) dt\right) e^{i\Delta\tau\mathcal{H}} \mathcal{H}_0(\tau) e^{-i\Delta\tau\mathcal{H}} \exp\left(-i \int_{\tau_s}^\tau \mathcal{H}_0(t) dt\right) \quad (2.1.19)$$

verbleibt. Mit Hilfe des Zeitordnungsoperators \mathcal{T} können wir die Lösung

$$U_2(\tau, \tau_s) = \mathcal{T} \left[\exp\left(-i \int_{\tau_s}^\tau F(t) dt\right) \right] \quad (2.1.20)$$

mit

$$F(t) := \tilde{\mathcal{H}}_0(t) - \mathcal{H}_0(t) \quad (2.1.21)$$

formulieren. Würden die Hamiltonoperatoren \mathcal{H} und $\mathcal{H}_0(t)$ vertauschen, würde $F(t)$ verschwinden. Dies ist im Allgemeinen gleichbedeutend mit verschwindender Kopplung zwischen Spin und Bad. Man beachte, dass für $F(t)$ in führender Ordnung

$$F(t) = \mathcal{O}(t\lambda) \quad (2.1.22)$$

gilt. Im Folgenden wird $F(t)$ als Reihe in \mathcal{H} entwickelt. Konkret bedeutet das eine Entwicklung in den Parametern $t\lambda$ und $t\omega$, was einer Entwicklung in der Pulslänge τ_p entspricht⁴. Somit ist der gewählte Ansatz geeignet, unser Ziel – eine Entwicklung für kurze Pulsdauern – zu realisieren. Die Funktion $F(t)$ kann kompakt als

$$F(t) = v(t) \left(e^{i\sigma_y\varphi(t)} \sigma_y(\Delta t) e^{-i\sigma_y\varphi(t)} - \sigma_y \right) \quad (2.1.23)$$

geschrieben werden, wobei

$$\sigma_y(\Delta t) := e^{i\Delta t\mathcal{H}} \sigma_y e^{-i\Delta t\mathcal{H}} \quad (2.1.24)$$

definiert wurde.

Mit analogen Schritten wie denen zur Bestimmung von U_2 nähern wir uns nun U_1

$$U_p(\tau_s, \tau) = U_1(\tau_s, \tau) e^{i\varphi(\tau)\sigma_y} e^{i\Delta\tau\mathcal{H}} \quad \text{mit } \tau \in [0, \tau_s[. \quad (2.1.25)$$

Zur Lösung benutzt man die komplex konjugierte Schrödingergleichung

$$-i \partial_\tau U_p(\tau_s, \tau) = U_p(\tau_s, \tau) [\tilde{\mathcal{H}}_0(\tau), \mathcal{H}] , \quad (2.1.26)$$

wobei man ausnutzt, dass

$$U_p^\dagger(t_1, t_2) = U_p(t_2, t_1) \quad (2.1.27)$$

gilt. Einsetzen liefert

$$-i \partial_\tau U_1(\tau_s, \tau) = U_1(\tau_s, \tau) F(\tau) , \quad (2.1.28)$$

wobei $F(t)$ gleich dem in Gleichung (2.1.21) definierten ist. Formale Integration liefert

$$U_1(\tau_s, \tau) = \mathcal{T} \left[\exp\left(-i \int_\tau^{\tau_s} F(t) dt\right) \right] . \quad (2.1.29)$$

Kombiniert man nun die Korrekturterme U_1 und U_2 , so erhält man

$$\begin{aligned} U_p(\tau_p, 0) &= U_p(\tau_p, \tau_s) U_p(\tau_s, 0) \\ &= e^{-i(\tau_p - \tau_s)\mathcal{H}} e^{-i\sigma_y\varphi(\tau_p)} U_F(\tau_p, 0) e^{i\sigma_y\varphi(0)} e^{-i\tau_s\mathcal{H}} \end{aligned} \quad (2.1.30)$$

⁴Die Parameter λ bzw. ω stehen dabei stellvertretend für die charakteristische Energieskala der Kopplungsparameter λ_i des Spins mit dem Bad und der ω_i also der badinternen Kopplungen.

mit (vergleiche (2.1.12))

$$\begin{aligned}
U_F(\tau_p, 0) &= U_2(\tau_p, \tau_s) U_1(\tau_s, 0) \\
&= \mathcal{T} \left[\exp \left(-i \int_{\tau_s}^{\tau_p} F(t) dt \right) \right] \mathcal{T} \left[\exp \left(-i \int_0^{\tau_s} F(t) dt \right) \right] \\
&= \mathcal{T} \left[\exp \left(-i \int_0^{\tau_p} F(t) dt \right) \right] .
\end{aligned} \tag{2.1.31}$$

Die letzte Umformung ist möglich, da die Integralgrenzen der zweiten Formelzeile in (2.1.31) so liegen, dass die globale Zeitordnung der letzten Formelzeile keinen Unterschied darstellt.

Mit diesem Ausdruck hat man die Abweichung des realen Pulses vom idealen Puls als zeitgeordnetes Produkt der Funktion $F(t)$ dargestellt.

2.1.3. Entwicklung bis zur zweiten Ordnung

Im nächsten Schritt soll $v(t)$ so gewählt werden, dass die Korrekturen U_F möglichst nahe der Identität $\mathbb{1}$ liegen. Da die Funktion $F(t)$ von der Ordnung $\mathcal{O}(t\lambda)$ ist und somit mit $t\lambda \rightarrow 0$ verschwindet, bildet die Entwicklung nach F ein adäquates Mittel. Konkret benutzen wir hierzu die Magnus-Entwicklung (Magnus 1954), auf die in Anhang A.1.2 näher eingegangen wird, und sortieren die resultierenden Terme anschließend nach Potenzen von $t\lambda$ bzw. $t\omega$. Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist, dass hier auf bekannte Resultate zurückgegriffen werden kann.

Die Magnus-Entwicklung von U_F (2.1.31) erzeugt

$$U_F(\tau_p, 0) = e^{-i\tau_p(F^{(1)}+F^{(2)}+F^{(3)}+\dots)} \tag{2.1.32a}$$

mit

$$F^{(1)} = \frac{1}{\tau_p} \int_0^{\tau_p} f(t) dt , \tag{2.1.32b}$$

$$F^{(2)} = -\frac{i}{2\tau_p} \int_0^{\tau_p} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [F(t_1), F(t_2)] . \tag{2.1.32c}$$

Im nächsten Schritt entwickelt man $F(t)$ in Δt , dabei nutzt man die Identität

$$\sigma_y(\Delta t) = \sigma_y + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n}{n!} (\Delta t)^n \llbracket \mathcal{H}, \sigma_y \rrbracket_n . \tag{2.1.33}$$

Der Ausdruck $\llbracket \dots, \dots \rrbracket$ steht dabei für verschachtelte Kommutatoren im Sinne von

$$\llbracket \mathcal{H}, \sigma_y \rrbracket_1 = [\mathcal{H}, \sigma_y] = -2i\sigma_x\lambda A , \tag{2.1.34a}$$

$$\llbracket \mathcal{H}, \sigma_y \rrbracket_2 = [\mathcal{H}, [\mathcal{H}, \sigma_x]] = -2i\sigma_x\lambda [\mathcal{H}_b, A] + 4\sigma_y\lambda^2 A^2 , \tag{2.1.34b}$$

$$\llbracket \mathcal{H}, \sigma_y \rrbracket_3 = [\mathcal{H}, [\mathcal{H}, [\mathcal{H}, \sigma_y]]] = \dots . \tag{2.1.34c}$$

Damit erhält man schließlich

$$\sigma_y(\Delta t) - \sigma_y = 2\sigma_x\Delta t\lambda A + (i\sigma_x\lambda [\mathcal{H}_b, A] - 2\sigma_y\lambda^2 A^2) (\Delta t)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) . \tag{2.1.35}$$

Unter Benutzung elementarer Umformungen wie

$$e^{i\sigma_y\varphi(t)} \sigma_x e^{-i\sigma_y\varphi(t)} = \cos(\psi)\sigma_x + \sin(\psi)\sigma_z \tag{2.1.36}$$

gelingt es, U_F als Reihe in t darzustellen

$$U_F(\tau_p, 0) = \mathbf{e}^{-i(\eta^{(1)} + \eta^{(2)} + \dots)} , \quad (2.1.37)$$

mit

$$\eta^{(1)} = (\eta_{11}\sigma_x + \eta_{12}\sigma_z)\lambda A \quad (2.1.38a)$$

und

$$\eta^{(2)} = i(\eta_{21}\sigma_x + \eta_{22}\sigma_z)\lambda [\mathcal{H}_b, A] + \eta_{23}\sigma_y\lambda^2 A^2 . \quad (2.1.38b)$$

Die Operatoren $\eta^{(1)}$ und $\eta^{(2)}$ sind dabei dimensionslos, was durch die einheitenbehafteten Koeffizienten η_{ij} gewährleistet wird. Diese sind durch die Integrale

$$\eta_{11} := (\tau_p - \tau_s) \sin \psi(\tau_p) + \tau_s \sin \psi(0) - \int_0^{\tau_p} dt \sin \psi(t) \quad (2.1.39a)$$

$$\eta_{12} := (\tau_p - \tau_s) \cos \psi(\tau_p) + \tau_s \cos \psi(0) - \int_0^{\tau_p} dt \cos \psi(t) \quad (2.1.39b)$$

$$\eta_{21} := \frac{(\tau_p - \tau_s)^2}{2} \sin \psi(\tau_p) - \frac{\tau_s^2}{2} \sin \psi(0) - \int_0^{\tau_p} dt \Delta t \sin \psi(t) \quad (2.1.39c)$$

$$\eta_{22} := -\frac{(\tau_p - \tau_s)^2}{2} \cos \psi(\tau_p) + \frac{\tau_s^2}{2} \cos \psi(0) + \int_0^{\tau_p} dt \Delta t \cos \psi(t) \quad (2.1.39d)$$

$$\begin{aligned} \eta_{23} := & (\tau_p - \tau_s)\tau_s \sin \theta - \tau_s \int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t) - \psi(0)) dt \\ & - (\tau_p - \tau_s) \int_0^{\tau_p} \sin(\psi(\tau_p) - \psi(t)) dt \\ & + \frac{1}{2} \iint_0^{\tau_p} dt_1 dt_2 \sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) \operatorname{sgn}(t_1 - t_2) . \end{aligned} \quad (2.1.39e)$$

gegeben. Etwas kompakter kann man diese Gleichungen nach partieller Integration folgendermaßen

$$\eta_{11} = 2 \int_0^{\tau_p} \Delta t v(t) \cos(\psi(t)) dt , \quad (2.1.40a)$$

$$\eta_{12} = 2 \int_0^{\tau_p} \Delta t v(t) \sin(\psi(t)) dt , \quad (2.1.40b)$$

$$\eta_{21} = \int_0^{\tau_p} (\Delta t)^2 v(t) \cos(\psi(t)) dt , \quad (2.1.40c)$$

$$\eta_{22} = \int_0^{\tau_p} (\Delta t)^2 v(t) \sin(\psi(t)) dt , \quad (2.1.40d)$$

$$\eta_{23} = -2 \int_0^{\tau_p} (\Delta t)^2 v(t) dt + 4 \int_0^{\tau_p} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \Delta t_1 \Delta t_2 v_1 v_2 \sin(\psi_1 - \psi_2) . \quad (2.1.40e)$$

formulieren. Abkürzend wurden der doppelte zeitabhängige Drehwinkel ψ_i statt $\psi(t_i)$ und die Pulsamplitude v_i statt $v(t_i)$ ($i \in [1, 2]$) genutzt. Die letzte Zeile in (2.1.40e) entsteht aus dem Kommutator

$$\begin{aligned} [F(t_1), F(t_2)] &= \Delta t_1 \Delta t_2 v_1 v_2 ([\sigma_z, \sigma_x] \sin \psi_1 \cos \psi_2 \\ &\quad + [\sigma_x, \sigma_y] \cos \psi_1 \sin \psi_2) \lambda^2 A^2 \\ &= 2i \Delta t_1 \Delta t_2 v_1 v_2 \sigma_y \sin(\psi_1 - \psi_2) \lambda^2 A^2 . \end{aligned} \quad (2.1.41)$$

2.1.4. Optimierte Pulse

Um nun optimierte Pulse zu generieren, wählt man eine allgemeine Pulsform (stückweise konstant, Fourierreihe, ...) und bestimmt die freien Parameter (Amplituden, Zeitintervalle) analytisch bzw. numerisch so, dass die Entwicklungskoeffizienten η_{ij} aus Gleichung (2.1.38) möglichst verschwinden. Die Zahl der freien Parameter wird gemäß der gewünschten Ordnung des zu optimierenden Pulses gewählt.

2.1.4.1. Lineare Ordnung

Will man die Terme linearer Ordnung zum Verschwinden bringen, d.h. $\eta^{(1)} = 0$ bzw. $\eta_{11} = \eta_{12} = 0$, so erhält man aus (2.1.39a) und (2.1.39b) die Gleichungen

$$0 = (\tau_p - \tau_s) \sin(\psi(\tau_p)) + \tau_s \sin(\psi(0)) - \int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt \quad (2.1.42a)$$

$$0 = (\tau_p - \tau_s) \cos(\psi(\tau_p)) + \tau_s \cos(\psi(0)) - \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt . \quad (2.1.42b)$$

Diese Gleichungen sind symmetrisch unter der Transformation $t \rightarrow \tau_p - t$. Erfüllt die Feldamplitude $v(t)$ die Gleichungen (2.1.42), so erfüllt $v(\tau_p - t)$ sie auch für $\tau_p - \tau_s$.

2.1.4.2. Zweite Ordnung

Auch die zweite Ordnung $\eta^{(2)}$ kann man durch partielle Integration so schreiben, dass der Feldverlauf $v(t)$ nicht explizit auftritt

$$\eta_{21} = \frac{(\tau_p - \tau_s)^2}{2} \sin(\psi(\tau_p)) - \frac{\tau_s^2}{2} \sin(\psi(0)) - \int_0^{\tau_p} \Delta t \sin(\psi(t)) dt \quad (2.1.43a)$$

$$\eta_{22} = -\frac{(\tau_p - \tau_s)^2}{2} \cos(\psi(\tau_p)) + \frac{\tau_s^2}{2} \cos(\psi(0)) - \int_0^{\tau_p} \Delta t \cos(\psi(t)) dt \quad (2.1.43b)$$

$$\begin{aligned} \eta_{23} &= (\tau_p - \tau_s) \tau_s \sin(\theta) - \tau_s \int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t) - \psi(0)) dt \\ &\quad - (\tau_p - \tau_s) \int_0^{\tau_p} \sin(\psi(\tau_p) - \psi(t)) dt \\ &\quad + \frac{1}{2} \iint_0^{\tau_p} \sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) \operatorname{sgn}(t_1 - t_2) dt_1 dt_2 . \end{aligned} \quad (2.1.43c)$$

wobei $\operatorname{sgn}(x)$ das Vorzeichen von x liefert.

Zur Optimierung der ersten und zweiten Ordnung muss man also insgesamt fünf Gleichungen ((2.1.42) und (2.1.43)) erfüllen. Die minimale Anzahl der benötigten Parameter (inklusive τ_s) beträgt somit auch fünf.

Durch Symmetrieargumente lässt sich diese Rechnung weiter vereinfachen. Betrachtet man symmetrische Pulse $\tau_s = \tau_p/2$, so ist $\psi(t)$ eine ungerade Funktion⁵ um τ_s . So verschwinden die Koeffizienten η_{11} und η_{22} wegen ihrer Antisymmetrie. Es verbleiben lediglich drei zu erfüllende Bedingungen.

⁵Erinnerung: $2v(t) = \partial_t \psi(t)$.

2.1.4.3. Grenzen der Näherung

Leider ist es unmöglich einen π -Puls in dritter Ordnung zu generieren, also $\eta^{(1)} = \eta^{(2)} = 0$ zu erreichen.

Zum Beweis dieser Aussage vereint man die reellen Gleichungen (2.1.43a) und (2.1.43b) zu einer komplexen Gleichung

$$0 = \tau_s^2 e^{i\psi(0)} - (\tau_p - \tau_s)^2 e^{i\psi(\tau_p)} + 2 \int_0^{\tau_p} \Delta t e^{i\psi(t)} dt . \quad (2.1.44)$$

Im Falle eines π -Pulses, also $\theta = \psi(\tau_p) - \psi(0) = \psi \Rightarrow e^{i\theta} = -1$, ergibt sich

$$\begin{aligned} \tau_s^2 + (\tau_p - \tau_s)^2 &= -2 \int_0^{\tau_p} \Delta t e^{i(\psi(t) - \psi(0))} dt \\ &\leq 2 \int_0^{\tau_p} |\Delta t| dt \\ &\leq \tau_s^2 + (\tau_p - \tau_s)^2 . \end{aligned} \quad (2.1.45a)$$

Diese Ungleichung bzw. Gleichung kann nur erfüllt werden, wenn der Exponent der ersten Zeile $\psi(t) - \psi(0)$ bei $\Delta t = t - \tau_s = 0$, seinen Wert von -1 auf 1 sprunghaft wechselt. Dies entspricht einem instantanten idealen Pulse unendlicher Amplitude, was experimentell nicht erreichbar ist⁶. Somit ist gezeigt, dass ein π -Puls nicht in zweiter Ordnung korrigiert werden kann.

Trotz intensiver Suche gelang es nicht einen $\pi/2$ -Puls zu generieren, der die zweite Ordnung gänzlich optimiert. Die besten Resultate lagen bei $\eta_{23} \approx 10^{-2}$. Ob weiteren Verbesserungen grundsätzliche Aspekte entgegenstehen, oder ob mit anderen Methoden, wie der Verwendung anderer Optimierungsalgorithmen oder anderer Pulsformen (anstelle stückweise konstanter), bessere Resultate erzielt werden können, bleibt vorerst offen.

Eine mögliche Antwort auf das Problem der π -Pulse ist die Durchführung zweier $\pi/2$ -Pulse nacheinander. Dies ist aber im Rahmen der hier gemachten Betrachtung nicht möglich. Gemäß Gleichung (2.1.30) findet vor und nach dem idealen Puls eine Zeitentwicklung statt. Somit können Pulse größerer Drehwinkel nicht durch additive Anwendung kleinerer Drehwinkel gemäß \mathcal{H} erzeugt werden.

2.1.4.4. Idealpuls am Ende des Realpulses ($\tau_p = \tau_s$)

Vom experimentellen Standpunkt aus wäre es interessant, einen Puls zu generieren, dessen Wirkung sich erst am Ende des realen Pulses entfaltet, d.h. für den $\tau_p = \tau_s$ gilt. Bei einem solchen Puls wäre es möglich, die resultierende Wirkung/Antwort des Systems viel schneller als sonst zu messen.

Leider ist dieser Wunsch hier nicht realisierbar. Dazu betrachten wir die Gleichungen (2.1.40a) und (2.1.40b) und kombinieren diese zu einer komplexen Gleichung

$$0 = \tau_p e^{i\psi(0)} - \int_0^{\tau_p} e^{i\psi(t)} dt . \quad (2.1.46)$$

Wieder gelingt es, eine Abschätzung zu treffen

$$\tau_p = \int_0^{\tau_p} e^{i(\psi(t) - \psi(0))} dt \leq \int_0^{\tau_p} 1 dt = \tau_p . \quad (2.1.47)$$

⁶Andernfalls wären unsere Bemühungen und Rechnungen von vornherein sinnlos.

Diese Abschätzung kann nur durch ein $\psi(t)$ erfüllt werden, das stückweise konstant mit Sprüngen um 2π ist. Das Feld $v(t)$ entspräche dabei einem instantanen Puls unendlicher Stärke, also einem idealen δ -Puls.

Somit ist es schon in linearer Ordnung unmöglich, $\tau_p = \tau_s$ exakt zu erreichen.

Auch wenn damit der Fall $\tau_p = \tau_s$ nicht erreichbar ist, kann man versuchen, dies näherungsweise zu realisieren und τ_s möglichst nahe an τ_p heranzubringen. Die angesprochene wachsende Feldamplitude wird dabei aber immer problematisch bleiben.

2.1.4.5. Ergebnisse der Optimierung

Stückweise konstante Pulse lassen sich relativ leicht numerisch analysieren, da der Hamiltonoperator in den jeweiligen Zeitintervallen zeitlich konstant ist. Somit lässt sich die zeitliche Entwicklung in den einzelnen Intervallen als $e^{-iH\Delta t}$ schreiben. Den vollen zeitlichen Propagator erhält man durch Multiplikation der einzelnen Propagatoren.

Derartige Pulse sind auch experimentell von Bedeutung, da diese eine Standardtechnik der Kernspinresonanz darstellen. Natürlich muss man dabei aber auch im Auge behalten, dass eine experimentelle Realisierung auch von unseren realen Pulsen abweicht.

So ist es im Experiment u.a. schwierig bis unmöglich, den „Umschaltvorgang“ exakt zu gewährleisten. Hier kommt es oft zu sogenannten Rampen, d.h. statt einem instantanen Umschalten dauert dieser Vorgang eine kurze Zeit und man hat einen Anstieg/Abfall der Amplitude über ein gewisses Zeitintervall.

Auch kann es bei den Schaltvorgängen zu Über-/Unterschwingungen kommen, d.h. die Amplitude beträgt nicht sofort den gewünschten Wert, sondern braucht eine gewisse „Einschwingzeit“. Diese Effekte sind in Abbildung 2.1 skizziert. Natürlich sind die experimentellen Abweichungen auch durch die zur Verfügung stehenden Materialien, wie Schwingkreise, etc. bestimmt. Weitere experimentelle Herausforderungen und passende Lösungen werden u.a. in Referenz (Vega 2004) besprochen.

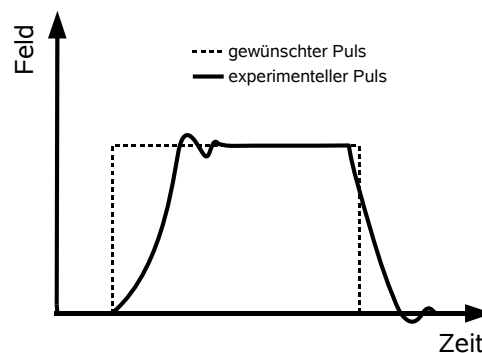


Abbildung 2.1 Skizze eines realistischen Pulses verglichen mit dem idealisierten stückweise konstanten Puls..

Die stückweise konstanten Pulse werden generiert, in dem die η -Gleichungen ((2.1.38) nur hinsichtlich der Umschaltzeiten (bzw. der Segmentdauern) optimiert werden. Sind diese gefunden,

wird eine alternierende Amplitude A so bestimmt, dass die Pulsfläche dem gesuchten Drehwinkel $\Theta = 2\Phi$ entspricht⁷. In Formeln bedeutet das

$$\Delta T = \sum_j (-1)^j \tau_i \quad (2.1.48a)$$

$$A = \frac{\Phi}{\Delta T} . \quad (2.1.48b)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wurden aufgrund des hohen Interesses an π - bzw. $\pi/2$ -Pulse nur eben solche eingehender untersucht, d.h.

$$\Phi \in \left\{ \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4} \right\} . \quad (2.1.49)$$

Wir unterscheiden dabei symmetrische ($\tau_s = \tau_p/2$) und asymmetrische Pulse. Die Wahl symmetrischer Pulse erleichtert die Optimierung, da Gleichung (2.1.43a) bereits automatisch erfüllt ist. Der symmetrische π -Puls U1 ist gleich dem von Cummins et al. gefundenen SCORPSE-Puls (s. Cummins & Jones 2000; Cummins et al. 2003).

Die hier gezeigten Ergebnisse fußen dabei aber auf anderen Annahmen und Zielen, als die von Cummins et al.. Während Cummins et al. versuchen, eine Pulsform zu finden, für die

$$U_p(\tau_p, 0) \approx P_\theta \quad (2.1.50a)$$

gilt, ist unser Ziel

$$U_p(\tau_p, 0) \approx \exp(-i(\tau_p - \tau_s)\mathcal{H}) P_\theta \exp(-i\tau_s\mathcal{H}) , \quad (2.1.50b)$$

zu realisieren. Der Propagator P_θ meint hier den idealen δ -Puls.

Zusammengefasst, zielen Cummins et al. auf eine volle Elimination der Badeinflüsse ab, wohingegen wir „nur“ die zeitliche Trennung der Evolution von Puls und Spin anstreben.

Nur im Fall eines π -Pulses unter statischer Kopplung $\mathcal{H} \propto \sigma_z$ mit $\tau_s = \tau_p/2$ entsprechen sich beide Ziele, da dann aus (2.1.50b)

$$\mathbf{e}^{-i\tau_p/2\hat{a}\sigma_z} P_\pi \mathbf{e}^{-i\tau_p/2\hat{a}\sigma_z} = P_\pi \mathbf{e}^{+i\tau_p/2\hat{a}\sigma_z} \mathbf{e}^{-i\tau_p/2\hat{a}\sigma_z} = P_\pi \quad (2.1.51)$$

also (2.1.50a) wird⁸.

Die folgenden Tabellen (2.1, 2.2 und 2.3) zeigen eine Übersicht der analysierten Pulse. Der Vollständigkeit halber sind hier auch nicht-optimierte einfache Pulse (SGLxxx) aufgeführt, die später zum Vergleich herangezogen werden. Da – wie bereits erwähnt – die Genauigkeit der Segmentdauern die Qualität der Pulse bestimmt und daraus die Amplituden berechnet werden, wird in diesen Tabellen die Amplitude nur auf wenige Nachkommastellen angegeben. In den eigentlichen Programmläufen wurde eine höhere Genauigkeit genutzt, die sich auch auf die Qualität der Ergebnisse auswirkt.

⁷Der Faktor 2 korrigiert den Faktor $1/2$ der **Spin**matrizen.

⁸Der ideale π -Puls P_π ist proportional zu σ_x . \hat{a} ist hier ein Operator des Bades.

# Segmente	τ_s	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
U1 (UPi) Abb. 2.2a				
3	0.5	$\tau_1 = 1/7$ $\tau_2 = 5/7$ $\tau_3 = 1/7$	$\pm \frac{7}{6}\pi$	$\eta_{21} = 0.044\,006$ $\eta_{22} = -1 \times 10^{-15}$ $\eta_{23} = 0.122\,93$
SGLPi (SGL1) Abb. 2.2b				
1	0.5	$\tau_1 = 1$	π	$\eta_{11} = 0$ $\eta_{12} = 0.636\,62$
ASY1 (ASYPi) Abb. 2.2c				
2	0.3408450569	$\tau_1 = 0.75$ $\tau_2 = 0.25$	$\pm\pi$	$\eta_{21} = -0.006\,530\,3$ $\eta_{22} = -0.184\,95$ $\eta_{23} = 0.180\,87$
ASY2 Abb. 2.2d				
3	0.5	$\tau_1 = 1/13$ $\tau_2 = 5/13$ $\tau_3 = 7/13$	$\pm \frac{13}{6}\pi$	$\eta_{21} = 0.124\,50$ $\eta_{22} = -0.147\,83$ $\eta_{23} = -0.001\,740\,2$

Tabelle 2.1 Tabelle der π -Pulse. Neben den Namen der Pulse (in Klammern alternative Bezeichnungen) sind die Referenzen zu den zugehörigen Abbildungen angegeben. Die erste Spalte (# Segmente) gibt die Zahl der Segmente des jeweiligen Pulses an; der Zeitpunkt τ_s bezeichnet den „Schwerpunkt“ der Pulse in Einheiten der Pulslänge τ_p ; die Spalte Dauer gibt die Zeitintervalle der einzelnen Pulssegmente in Einheiten von τ_p an; Ampl. gibt die Amplitude des jeweiligen Segments in Einheiten von τ_p^{-1} an; die Koeffizienten η_{ij} (vergleiche Gleichungen (2.1.42) und (2.1.43)) sind in der fünften Spalte angegeben. Sofern nicht explizit angegeben, sind die Koeffizienten niedrigerer Ordnung gleich Null. Die Einheit der η_{ij} richtet sich nach der Ordnung i in Einheiten von τ_p^{-i} .

# Segmente	τ_s	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
U2 (UPi2) Abb. 2.3a				
3	0.5	$\tau_1 = 0.131\,549\,787\,5$ $\tau_2 = 0.736\,900\,425$ $\tau_3 = 0.131\,549\,787\,5$	± 1.6577	$\eta_{21} = -0.013\,05$ $\eta_{22} = 0$ $\eta_{23} = 0.051\,51$
SGLPi2 Abb. 2.3b				
1	0.5	$\tau_1 = 1$	$\pi/2$	$\eta_{11} = 0$ $\eta_{12} = 0.193\,210$
ASY3 (ASYPi2) Abb. 2.3c				
2	0.2312820394	$\tau_1 = 0.782\,20$ $\tau_2 = 0.2178$	$\pm 1.391\,16$	$\eta_{21} = -0.012\,80$ $\eta_{22} = -0.056\,90$ $\eta_{23} = 0.089\,01$
ASY4 Abb. 2.3d				

# Segmente	τ_s	Dauern $\tau_i [\tau_p]$	Ampl. $[\tau_p^{-1}]$	$\eta_{ij} [\tau_p^{-i}]$
3	0.219	$\tau_1 = 0.448\,343\,241\,6$ $\tau_2 = 0.359\,787\,381\,1$ $\tau_3 = 0.191\,869\,377\,3$	$\pm 2.800\,74$	$\eta_{21} = 0.095\,60$ $\eta_{22} = -0.030\,60$ $\eta_{23} = -0.1525$

Tabelle 2.2 Tabelle der $\pi/2$ -Pulse. Zur Spaltenerklärung siehe Tabelle 2.1.

# Segmente	τ_s	Dauern $\tau_i [\tau_p]$	Ampl. $[\tau_p^{-1}]$	$\eta^{(2)} [\tau_p^{-2}]$
S2nd1 (S2NDPi2)				Abb. 2.4a
5	0.5	$\tau_1 = 0.058\,475\,541\,89$ $\tau_2 = 0.165\,364\,353\,01$ $\tau_3 = 0.552\,320\,210\,2$ $\tau_4 = 0.165\,364\,353$ $\tau_5 = 0.058\,475\,541\,9$	2.319 94 -2.319 94 2.319 94 -2.319 94 2.319 94	$\eta_{21} \approx 0$ $\eta_{22} \approx 0$ $\eta_{23} = 0.013\,35$
A2nd1 (A2NDPi2)				Abb. 2.4b
4	0.6121824004	$\tau_1 = 0.083\,619\,167\,98$ $\tau_2 = 0.214\,663\,376\,12$ $\tau_3 = 0.603\,890\,535\,2$ $\tau_4 = 0.097\,826\,920\,7$	2.094 29 -2.094 29 2.094 29 -2.094 29	$\eta_{21} \approx 0$ $\eta_{22} \approx 0$ $\eta_{23} = 0.016\,61$

Tabelle 2.3 Tabelle der $\pi/2$ -2nd-Pulse. Zur Spaltenerklärung siehe Tabelle 2.1.

Zusätzlich werden in den Abbildungen 2.2, 2.3 und 2.4 die in den Tabellen beschriebenen Pulse grafisch veranschaulicht. Die Pulsamplituden lassen sich in diesen Abbildungen aufgrund der notwendigen Achsenskalierung nur bedingt ablesen. Daher wird in Abbildung 2.5 die maximale Pulsamplitude v_{\max} der einzelnen Pulse verglichen.

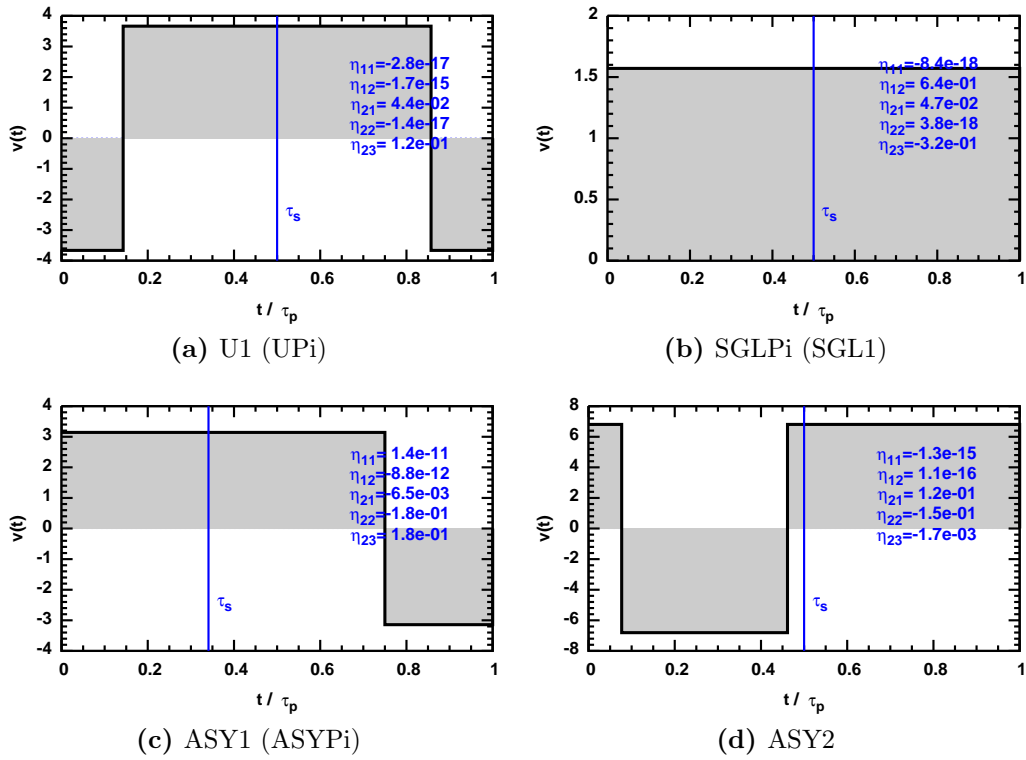


Abbildung 2.2 Grafische Darstellung der π -Pulse zu Tabelle 2.1.

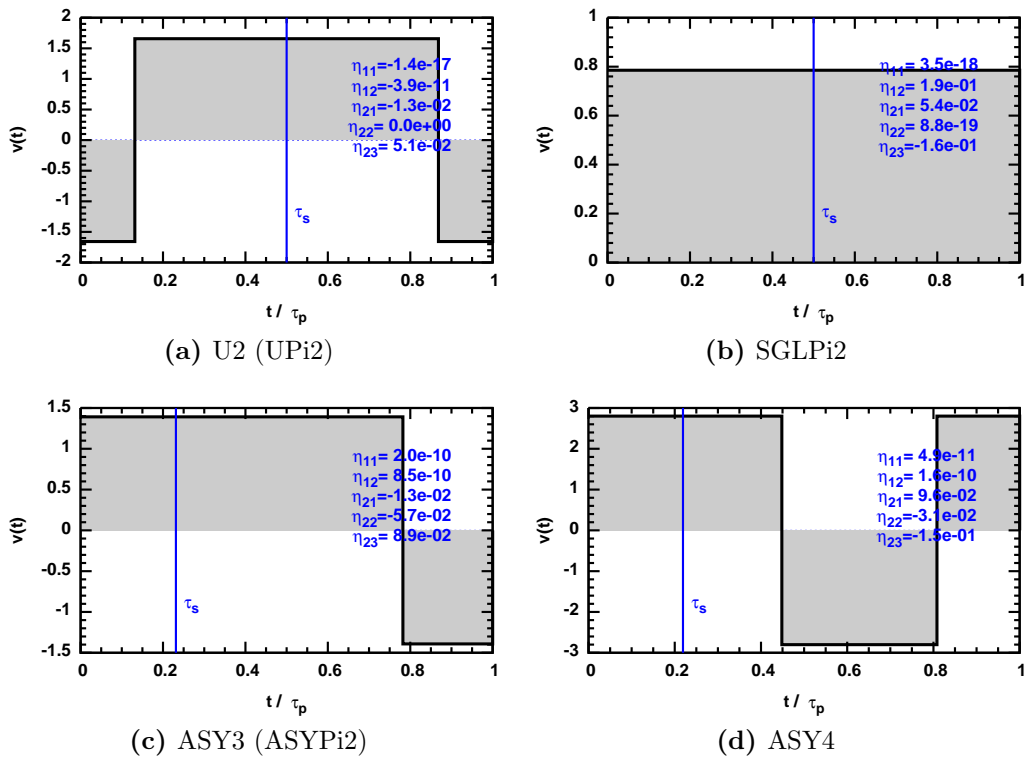


Abbildung 2.3 Grafische Darstellung der $\pi/2$ -Pulse zu Tabelle 2.2.

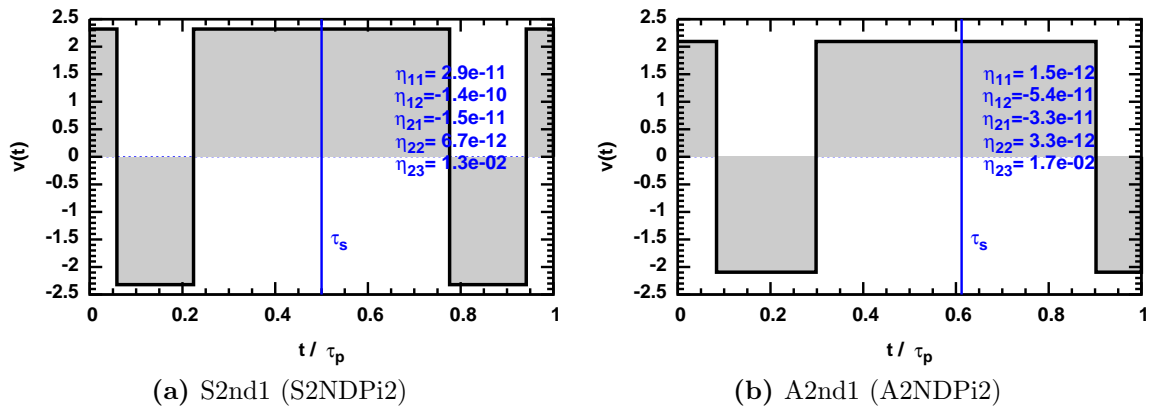


Abbildung 2.4 Grafische Darstellung der $\pi/2$ —2nd-Pulse zu Tabelle 2.3.

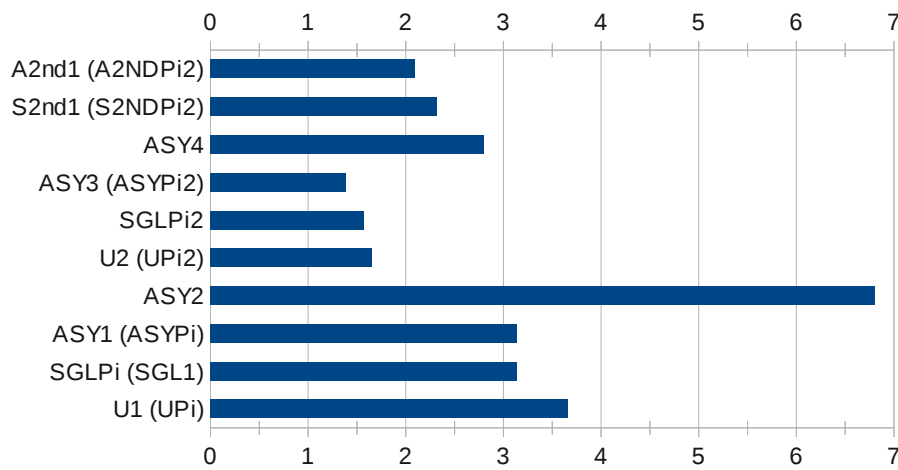


Abbildung 2.5 Vergleich der maximalen Pulsamplituden v_{\max} der in den Tabellen 2.1, 2.2 und 2.3 genannten Pulse.

2.2. Pulsoptimierung II

Wichtige Arbeiten

Pasini et al. 2009

PASINI, S. ; KARBACH, P. ; RAAS, C. ; UHRIG, G. S.: Optimized pulses for the perturbative decoupling of a spin and a decoherence bath. In: **Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)** 80 (2009), Nr. 2, 022328. – DOI 10.1103/PhysRevA.80.022328

2.2.1. Einleitung

In the framework of nuclear magnetic resonance (NMR), we consider the general problem of the coherent control of a spin coupled to a bath by means of composite or continuous pulses of duration τ_p . We show explicitly that it is possible to design the pulse in order to achieve a decoupling of the spin from the bath up to the third order in τ_p . The evolution of the system is separated in the evolution of the spin under the action of the pulse and of the bath times correction terms. We derive the correction terms for a general time dependent axis of rotation and for a general coupling between the spin and the environment. The resulting corrections can be made vanish by an appropriate design of the pulse. For π and $\pi/2$ pulses, we demonstrate explicitly that pulses exist which annihilate the first and the second order corrections even if the bath is fully quantum mechanical, i.e., it displays internal dynamics. Such pulses will also be useful for quantum information processing.

Abstract von Pasini et al. (2009).

Die vorgestellten Überlegungen ähneln den in Referenz (Pasini et al. 2008) gemachten. Nichtsdestotrotz ist diesmal das Anliegen nicht, die Zeitpropagation eines idealen Pulses umschlossen von Termen voller Zeitentwicklung zu gewährleisten, sondern Bad und Qubit direkt zu entkoppeln. Am Ende der Rechnungen erhält man Gleichungen (ähnlich (2.1.38)), die es erlauben, die zuvor genannten Probleme⁹ wie die Wahl von $\tau_s = \tau_p$ oder die Korrektur von π -Pulsen in höherer Ordnung, zu lösen.

Ziel wird es diesmal sein, Bad und Spinevolution zu trennen

$$U_p(\tau_p, 0) \approx e^{-i\tau_p \mathcal{H}_b} \hat{P}_\theta . \quad (2.2.1)$$

Durch die gewählte Zielsetzung wurde der Parameter τ_s , der im vorangegangenen Abschnitt 2.1 von zentraler Bedeutung war, überflüssig. Nichtsdestotrotz wurde in der ursprünglichen Herleitung dieser Parameter beibehalten, da hier auf den vorhergehenden Resultaten aufgebaut wurde und so analoge Rechenschritte vollzogen wurden.

Ähnlich wie im vorangegangenen Abschnitt 2.1 betrachten wir ein Modell

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_b + \vec{\sigma} \cdot \vec{A} , \quad (2.2.2)$$

das einen Badterm \mathcal{H}_b und einen Kopplungsterm des Bades \vec{A} an das Qubit $\vec{\sigma}$ beschreibt. Anders als in Gleichung (2.1.1) wird aber hier eine komplexere Kopplung – nämlich an alle 3 Spinkomponenten x, y und z – betrachtet.

So sind hier grundsätzlich neben reinen Dephasierungseffekten (T_2 -Relaxation) auch Spinflipfekte (T_1 -Relaxation) möglich. Wieder bezeichnen ω bzw. λ die Energieskalen von \mathcal{H}_b respektive \vec{A} .

⁹siehe Abschnitt 2.1.4.3, Seite 28

Auch die Form des Kontrollpulses wurde erweitert

$$\mathcal{H}_0(t) = \vec{\sigma} \cdot \vec{v}(t) , \quad (2.2.3)$$

so dass nun auch das zeitabhängige Feld $\vec{v}(t) = (v_x(t), v_y(t), v_z(t))^\top$ mehrere Raumkomponenten beinhaltet. Je nach Experiment muss man aber berücksichtigen, dass nicht alle dieser Komponenten zur Verfügung stehen. So war in früheren NMR-Aufbauten die z -Komponente nicht immer experimentell schaltbar, da das so genannte B_0 -Feld¹⁰ in eben diese Richtung weist und durch seine große Stärke alle Schaltfelder in diese Richtung verschwindend klein erscheinen ließ. Moderne Spektrometer sind aber dennoch dazu in der Lage.

Wieder interessiert uns die zeitliche Entwicklung des Systems im Zeitraum $t = 0 \dots \tau_p$

$$U_p(\tau_p, 0) = \mathcal{T} \left[\exp \left(-i \mathcal{H} \tau_p - i \int_0^{\tau_p} \mathcal{H}_0(\tau) d\tau \right) \right] . \quad (2.2.4)$$

Mit dem Operator \hat{P}_θ bezeichnen wir die ideale Rotation des Qubits unter Wirkung des Feldes $\vec{v}(t)$. Diese Zeitentwicklung wollen wir in Form eines dreiteiligen Ansatzes

$$U_p(\tau_p, 0) = e^{-i\tau_p \mathcal{H}_b} \mathcal{T} \left[e^{-i\vec{\sigma} \cdot \int_0^{\tau_p} \vec{v}(t) dt} \right] U(\tau_p, 0) \quad (2.2.5)$$

schreiben. Der unitäre Term $U(\tau_p, 0)$ beschreibt dabei die nötigen Korrekturen, die von Qubit-Bad-Kopplungsparameter λ und Pulsform $\vec{v}(t)$ abhängen. Im Fall verschwindender Kopplung ($\lambda = 0$) sind keine Korrekturen nötig, d.h. $U(\tau_p, 0) = \mathbb{1}$. Unser Ziel ist es, den allgemeinen Fall ($\lambda \neq 0$) zu betrachten und Bedingungen für $\vec{v}(t)$ zu finden, unter denen $U(\tau_p, 0) \approx \mathbb{1}$ gilt.

Wie auch im letzten Abschnitt angesprochen (s. Seite 30) befassen sich andere Autoren wie Cummins et al. mit anderen Zielsetzungen. Vergleicht man unser Ziel (2.2.1) mit (2.1.50a), so sind die Parallelen der beiden Ziele nun deutlicher als im vorangegangenen Abschnitt. Da der ideale Puls und der Hamiltonoperator des Bades kommutieren,

$$[\hat{P}_\theta, \mathcal{H}_b] = 0 , \quad (2.2.6)$$

ist auch – wie in Gleichung (2.1.50a) aus (Cummins & Jones 2000)) – die Entkopplung von Bad und Spin selbst während des Pulses gewährleistet.

Unser Ansatz erlaubt darüber hinaus aber eine breitere Klasse von Lösungsmöglichkeiten, da die „freie“ Evolution des Bades nicht unterdrückt wird.

2.2.1.1. Rechnung

Den zeitgeordneten Teil unseres Ansatzes 2.2.5

$$\hat{P}_\tau := \mathcal{T} \left[e^{-i\vec{\sigma} \cdot \int_0^\tau \vec{v}(t) dt} \right] \quad \forall \tau \quad (2.2.7a)$$

$$= e^{-i/2\vec{\sigma} \cdot \hat{a}(\tau) \psi(\tau)} \quad (2.2.7b)$$

schreiben wir als eine Drehung um eine Achse $\hat{a}(\tau)$ ($|\hat{a}(\tau)| = 1$) um einen Winkel $\psi(\tau)$. Beide Größen sind zu diesem Zeitpunkt noch nicht näher bestimmt, erleichtern bzw. ermöglichen

¹⁰Welches der initialen Ausrichtung der Kernspins dient.

aber im weiteren Verlauf die Rechnungen. Lediglich der finale Winkel $\psi(\tau_p) = \theta$ ist durch den gewünschten Drehwinkel festgelegt.

Zur Bestimmung der Korrekturen $U(\tau_p, 0)$ betrachten wir die Schrödingergleichung für \hat{P}_τ

$$i \partial_\tau \hat{P}_\tau = \mathcal{H}_0(\tau) \hat{P}_\tau . \quad (2.2.8)$$

In Referenz (Pasini & Uhrig 2008) wird gezeigt, wie man (2.2.8) direkt mit $\vec{v}(t)$ bzw. $\hat{a}(t)$ und $\psi(t)$ in Verbindung bringt. Jede Rotation im Spinraum, also auch \hat{P}_τ lässt sich als

$$\hat{P}_\tau = \cos(\psi(t)/2) - i(\vec{\sigma} \cdot \hat{a}(t)) \sin(\psi(t)/2) \quad (2.2.9)$$

schreiben. Dies bedeutet, dass – je nach Drehwinkel – ein gewisser Anteil der Spinkomponenten im ursprünglichen Zustand (multipliziert mit $\cos(\psi(t)/2)$) verbleibt, der andere Teil sich aber entsprechend der gewählten Drehachse verändert. Für die zeitliche Ableitung erhält man

$$\partial_\tau \hat{P}_\tau = \frac{\psi'(\tau)}{2} \left(-\sin(\psi(\tau)/2) - i \vec{\sigma} \cdot \hat{a}(\tau) \cos(\psi(\tau)/2) \right) - i \vec{\sigma} \cdot \hat{a}'(\tau) \sin(\psi(\tau)/2) . \quad (2.2.10)$$

Um einen Ausdruck für $\vec{v}(t)$ zu erhalten, formt man (2.2.8) zu

$$-i \vec{\sigma} \cdot \vec{v} = (\partial_\tau \hat{P}_\tau) \hat{P}_\tau^{-1} \quad (2.2.11a)$$

$$= \left\{ \frac{\psi'}{2} \left(-\sin \psi/2 - i \vec{\sigma} \cdot \hat{a} \cos \psi/2 \right) - i \vec{\sigma} \cdot \hat{a}' \sin \psi/2 \right\} (\cos \psi/2 + i \vec{\sigma} \cdot \hat{a} \sin \psi/2) \quad (2.2.11b)$$

$$= \frac{\psi'}{2} \left(-\frac{\sin \psi}{2} - i \vec{\sigma} \cdot \hat{a} \cos^2 \psi/2 \right) - \frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{a}' \sin \psi + \frac{i}{2} \psi' \left(-\vec{\sigma} \cdot \hat{a} \sin^2 \psi/2 - \frac{i}{2} (\vec{\sigma} \cdot \hat{a})^2 \sin \psi \right) + (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}') (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) \sin^2 \psi/2 \quad (2.2.11c)$$

um¹¹. Dadurch, dass

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{a})^2 = 1 \quad \text{und} \quad (\vec{m} \cdot \vec{\sigma}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) = \vec{m} \cdot \vec{n} + i \vec{\sigma} (\vec{m} \times \vec{n}) \quad (2.2.12)$$

(für beliebige Vektoren \vec{n}) gelten, können wir weiter umformen

$$-i \vec{\sigma} \cdot \vec{v} = \left[-\frac{\psi'}{4} - \frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{a}' + \frac{\psi'}{4} \right] \sin \psi - \frac{i}{4} \psi' \vec{\sigma} \cdot \hat{a} (1 + \cos \psi) - \frac{i}{4} \psi' \vec{\sigma} \cdot \hat{a} (1 - \cos \psi) + \frac{1}{2} (\hat{a}' \cdot \hat{a} + i \vec{\sigma} \cdot (\hat{a}' \times \hat{a})) (1 - \cos \psi) \quad (2.2.13a)$$

Der Ausdruck $\hat{a}' \cdot \hat{a}$ liefert Null, da die Ableitung senkrecht zum ursprünglichen Vektor steht. Zusammenfassend erhält man

$$2\vec{v}(\tau) = \psi'(\tau) \hat{a}(\tau) + \hat{a}(\tau) \sin(\psi(\tau)) - (1 - \cos(\psi(\tau))) (\hat{a}'(\tau) \times \hat{a}(\tau)) . \quad (2.2.14a)$$

Multipliziert man dies skalar mit $\hat{a}(\tau)$, ergibt sich

$$\vec{v}(\tau) \cdot \hat{a}(\tau) = \frac{\psi'(\tau)}{2} \quad (2.2.14b)$$

die zeitliche Ableitung von $\psi(\tau)$. Gleichung (2.2.14a) kann auch benutzt werden, um $\psi(\tau)$ und $\hat{a}(\tau)$ per Integration zu berechnen. Auf diese Weise kann ein experimentell verfügbarer Puls in unsere Parametrisierung (Gleichung (2.2.9)) „übersetzt“ werden.

¹¹Die Zeitabhängigkeit der Funktionen $v(\tau)$, $\psi(\tau)$ und $\hat{a}(\tau)$ wurde der Übersichtlichkeit halber nicht explizit angegeben. Die Striche bei \hat{a}' und ψ' stehen für die Zeitableitung.

Die Schrödingergleichung der vollen Zeitentwicklung lautet

$$i \partial_\tau U_p(\tau, 0) = (\mathcal{H} + \mathcal{H}_0(\tau)) U_p(\tau, 0) . \quad (2.2.15)$$

Mit der Funktion

$$G(\tau) := e^{i\mathcal{H}_b\tau} \hat{P}_\tau^{-1} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) \hat{P}_\tau e^{-i\mathcal{H}_b\tau} \quad (2.2.16)$$

erhalten wir mit der Lösung von Gleichung (2.2.15)

$$i \partial_\tau U(\tau, 0) = G(\tau) U(\tau, 0) . \quad (2.2.17)$$

Dazu wurde die Ableitung

$$\begin{aligned} i \partial_\tau U_p(\tau, 0) &= \mathcal{H}_b e^{-i\mathcal{H}_b\tau} \hat{P}_\tau U(\tau, 0) \\ &\quad + i e^{-i\mathcal{H}_b\tau} (\partial \hat{P}_\tau) U(\tau, 0) + i e^{-i\mathcal{H}_b\tau} \hat{P}_\tau \partial_\tau U(\tau, 0) \end{aligned} \quad (2.2.18a)$$

$$= (\mathcal{H}_b + \vec{\sigma} \cdot \vec{A} + \mathcal{H}_0(\tau)) e^{-i\mathcal{H}_b\tau} \hat{P}_\tau U(\tau, 0) \quad (2.2.18b)$$

explizit berechnet. Anschließend wird (2.2.8) benutzt und umgeformt

$$\begin{aligned} \cancel{\mathcal{H}_b U(\tau, 0)} + \cancel{\hat{P}_\tau^{-1} \mathcal{H}_0(\tau) \hat{P}_\tau U(\tau, 0)} + i \partial_\tau U(\tau, 0) &= \\ \cancel{\mathcal{H}_b U(\tau, 0)} + \cancel{\hat{P}_\tau^{-1} \mathcal{H}_0(\tau) \hat{P}_\tau U(\tau, 0)} + G(\tau) U(\tau, 0) . \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

Uns interessieren die Korrekturen zum Zeitpunkt $\tau = \tau_p$. In diesem Fall erhalten wir die formale Lösung von (2.2.17) durch

$$U(\tau_p, 0) = \mathcal{T} \left[e^{-i \int_0^{\tau_p} G(t) dt} \right] . \quad (2.2.20)$$

Im Folgenden gilt es also, die Funktion $G(\tau)$ explizit zu berechnen. Dazu definieren wir eine weitere Funktion

$$\tilde{H}_{qb} := \hat{P}_\tau^{-1} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) \hat{P}_\tau \quad (2.2.21a)$$

$$= \vec{\sigma} \cdot \vec{A} \cos \psi - \vec{\sigma} \cdot (\hat{a}(\tau) \times \vec{A}) \sin \psi(\tau) + 2 (\hat{a}(\tau) \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}(\tau)) \sin^2 \psi(\tau)/2 , \quad (2.2.21b)$$

mit der sich

$$G(\tau) = e^{i\mathcal{H}_b\Delta\tau} \tilde{H}_{qb} e^{-i\mathcal{H}_b\Delta\tau} \quad (2.2.22)$$

schreiben lässt.

Gleichung (2.2.21b) ergibt sich, indem man (2.2.9) benutzt. Neben (2.2.12) erweist sich auch

$$\vec{m} \times \vec{n} \times \vec{l} = \vec{n} (\vec{m} \cdot \vec{l}) - \vec{l} (\vec{m} \cdot \vec{n}) \quad (2.2.23)$$

als nützlich. Man berechnet

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{qb} &= (\vec{\sigma} \cdot \vec{A} \cos \psi/2 + i \vec{\sigma} \cdot \hat{a} \sin \psi/2) (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{A} \cos \psi/2 - i \vec{\sigma} \cdot \hat{a} \sin \psi/2) \\ &= \vec{\sigma} \cdot \vec{A} \cos^2 \psi/2 + (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) [\vec{A} \cdot \hat{a} + i \vec{\sigma} (\vec{A} \times \hat{a})] \sin^2 \psi/2 \\ &\quad + \frac{i}{2} \sin \psi [-\vec{A} \cdot \hat{a} - i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \hat{a}) + \hat{a} \cdot \vec{A} + i \vec{\sigma} \cdot (\hat{a} \times \vec{A})] \\ &= \vec{\sigma} \cdot \vec{A} \cos^2 \psi/2 + \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \hat{a}) \sin \psi \\ &\quad + [(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) + i ((\hat{a} \times \vec{A}) \cdot \vec{\sigma} + \vec{\sigma} \cdot (\hat{a} \times \vec{A}))] \sin^2 \psi/2 \\ &= \vec{\sigma} \cdot \vec{A} \cos^2 \psi/2 + \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \hat{a}) \sin \psi \\ &\quad + \{(\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) (\vec{A} \cdot \hat{a}) - \vec{\sigma} \cdot [\underbrace{\vec{A}(\hat{a} \cdot \hat{a})}_{=1} - \hat{a}(\hat{a} \cdot \vec{A})]\} \sin^2 \psi/2 \\ &= \vec{\sigma} \cdot \vec{A} \cos \psi - \vec{\sigma} \cdot (\hat{a} \times \vec{A}) \sin \psi \\ &\quad + 2 (\hat{a} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) \sin^2 \psi/2 , \end{aligned}$$

wobei die Zeitabhängigkeit von $\hat{a}(\tau)$ und $\psi(\tau)$ nicht explizit angegeben wurde.

Weiter ist das Transformationsverhalten des Qubits unter der Rotation \hat{P}_τ von Interesse. Dazu definieren wir

$$\vec{S}(\tau) := \hat{P}_\tau^{-1} \vec{\sigma} \hat{P}_\tau \quad (2.2.24a)$$

$$= D_{\hat{a}}(\psi) \vec{\sigma} . \quad (2.2.24b)$$

Die 3×3 -Matrix $D_{\hat{a}}(\psi)$ beschreibt eine Drehung um die \hat{a} -Achse um den Winkel ψ . Somit ist es möglich Gleichung (2.2.21a) anders zu formulieren

$$\vec{H}_{qb} := \vec{S}(\tau) \cdot \vec{A} \quad (2.2.25a)$$

$$= (D_{\hat{a}}(\psi) \vec{\sigma}) \cdot \vec{A} \quad (2.2.25b)$$

$$= (D_{\hat{a}}(-\psi) \vec{A}) \cdot \vec{\sigma} \quad (2.2.25c)$$

$$:= \vec{n}_A(\tau) \cdot \vec{\sigma} . \quad (2.2.25d)$$

Den Vektor $\vec{n}_A(\tau)$ erhält man durch Vergleich mit (2.2.21b)

$$\begin{aligned} \vec{n}_A(\tau) &= \vec{A} \cos \psi(\tau) - (\hat{a}(\tau) \times \vec{A}) \sin \psi(\tau) \\ &\quad + \hat{a}(\tau) (\hat{a}(\tau) \cdot \vec{A}) (1 - \cos \psi(\tau)) . \end{aligned} \quad (2.2.26)$$

Durch den Vergleich von (2.2.25b) und (2.2.25c) erhält man die Drehmatrix

$$D_{\hat{a}}(-\psi) = \cos \psi \mathbb{1}_3 + \sin \psi \begin{pmatrix} 0 & a_z & -a_y \\ -a_z & 0 & a_x \\ a_y & -a_x & 0 \end{pmatrix} + (1 - \cos \psi) \begin{pmatrix} a_x^2 & a_x a_y & a_x a_z \\ a_x a_y & a_y^2 & a_y a_z \\ a_x a_z & a_y a_z & a_z^2 \end{pmatrix} . \quad (2.2.27)$$

2.2.1.2. Entwicklung nach $\tau_p \mathcal{H}$

Wie auch zuvor gehen wir davon aus, dass die Energieskalen von \vec{A} (also λ) und \mathcal{H}_b (also ω) relativ zu τ_p^{-1} kleine Größen sind. Damit entwickeln wir Ausdrücke in den Größen $\tau_b \omega$ und $\tau_p \lambda$.

Wir definieren den gedrehten Badoperator¹²

$$\vec{A}(\Delta t) := e^{i \mathcal{H}_b \Delta t} \vec{A} e^{-i \mathcal{H}_b \Delta t} \quad (2.2.28)$$

$$\vec{A} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n}{n!} (\Delta t)^n \llbracket \mathcal{H}_b, \vec{A} \rrbracket_n .$$

Im Falle eines statischen Bades, d.h.

$$\llbracket \mathcal{H}_b, \vec{A} \rrbracket = 0 ,$$

gilt $\vec{A}(\Delta t) = \vec{A}$.

Gemäß Gleichung (2.2.22) und der Benutzung der Umformungen für \mathcal{H}_{qb} (2.2.25) schreiben wir den zeitabhängigen Operator

$$G(t) = \vec{S}(t) \cdot \vec{A}(t) = \vec{n}_{A(t)}(t) \cdot \vec{\sigma} \quad (2.2.29)$$

¹²Der geschachtelte Kommutator $\llbracket \dots, \dots \rrbracket$ wurde bereits in Abschnitt 2.1.1 Gleichung (2.1.34) verwendet und erläutert.

als Reihe in t

$$G(t) = \vec{S}(t) \cdot \vec{A} + i t [\mathcal{H}_b, \vec{S}(t) \cdot \vec{A}] + \mathcal{O}(t^2) \quad (2.2.30a)$$

$$= \vec{n}_A(t) \cdot \vec{\sigma} + i t [\mathcal{H}_b, \vec{\sigma} \cdot \vec{n}_A(t)] + \mathcal{O}(t^2) . \quad (2.2.30b)$$

Durch entsprechende Wahl der Pulsparameter soll der Korrekturterm $U(\tau_p, 0)$ möglichst nahe bei $\mathbb{1}$ liegen. Dazu betrachten wir nun die Magnus-Entwicklung¹³ der Gleichung (2.2.20)

$$U(\tau_p, 0) = \exp \left[i \tau_p \left(G^{(1)} + G^{(2)} + \dots \right) \right] \quad (2.2.31)$$

mit

$$\tau_p G^{(1)} = \int_0^{\tau_p} G(t) dt \quad (2.2.32a)$$

$$\tau_p G^{(2)} = -\frac{i}{2} \int_0^{\tau_p} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [G(t_1), G(t_2)] . \quad (2.2.32b)$$

Durch Benutzung von (2.2.30b) erhält man

$$U(\tau_p, 0) = \exp \left[-i \left(\eta^{(1)} + \eta^{(2)} + \dots \right) \right] \quad (2.2.33)$$

mit

$$\eta^{(1)} = \int_0^{\tau_p} dt \vec{\sigma} \cdot \vec{n}_A(t) \quad (2.2.34a)$$

$$\eta^{(2)} = i \int_0^{\tau_p} dt t [\mathcal{H}_b, \vec{\sigma} \cdot \vec{n}_A(t)] \quad (2.2.34b)$$

$$- \frac{i}{2} \int_0^{\tau_p} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\vec{n}_A(t_1) \cdot \vec{n}_A(t_2) - \vec{n}_A(t_2) \cdot \vec{n}_A(t_1) \\ + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{n}_A(t_1) \times \vec{n}_A(t_2) - \vec{n}_A(t_2) \times \vec{n}_A(t_1))] .$$

Weitere konkretere Gleichungen erhält man, wenn man die Kopplung als

$$\vec{A} = (\lambda_x A_x, \lambda_y A_y, \lambda_z A_z)^\top \quad (2.2.35)$$

schreibt und von $[A_m, A_n] \neq 0$ für $m \neq n$ ausgeht. Letztendlich wollen wir skalare Gleichungen, d.h. ohne Operatoren, erhalten. Im ersten Schritt schreiben wir für die Komponenten $i = x, y, z$

$$n_{A(t),i}(t) = \sum_{j=x,y,z} \lambda_j n_{i,j}(t) A_j . \quad (2.2.36)$$

Die η_{ij} repräsentieren die Matrixelemente der Drehmatrix $D_{\hat{a}}(-\psi)$, wie sie in (2.2.27) angegeben sind. Dies führt zu den Gleichungen

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{n}_A(t) = \sum_{i,j} \sigma_i \lambda_j n_{i,j}(t) A_j , \quad (2.2.37a)$$

$$\vec{n}_A(t_1) \cdot \vec{n}_A(t_2) - \vec{n}_A(t_2) \cdot \vec{n}_A(t_1) = \\ \sum_{i;j < k} \lambda_j \lambda_k [A_j, A_k] (n_{i,j}(t_1) n_{i,k}(t_2) - n_{i,j}(t_2) n_{i,k}(t_1)) \quad (2.2.37b)$$

und

$$(\vec{n}_A(t_1) \times \vec{n}_A(t_2) - \vec{n}_A(t_2) \times \vec{n}_A(t_1))_i = \\ \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \sum_{l,m} \lambda_l \lambda_m (A_l A_m - A_m A_l) n_{i,j}(t_1) n_{k,m}(t_2) . \quad (2.2.37c)$$

¹³s. Anhang A.1.2 und die Referenzen (Magnus 1954; Burum 1981; Haeberlen & Waugh 1968)

ϵ_{ijk} bezeichnet dabei den total antisymmetrischen Levi-Civita-Tensor und $()_i$ steht für die i -te Komponente des Vektors. Alle Summationindizes i, j, k, l und m laufen über x, y, z .

Damit erhalten wir aus (2.2.34a) folgende Ausdrücke

$$\eta^{(1)} = \sum_i \sigma_i \eta_i^{(1)} \quad \text{und} \quad (2.2.38a)$$

$$\eta^{(2)} = \sum_i \sigma_i \left(\eta_i^{(2a)} + \eta_i^{(2b)} \right) + \eta^{(2c)} . \quad (2.2.38b)$$

Die einzelnen Bestandteile lauten

$$\eta_i^{(1)} := \sum_j \lambda_j A_j \int_0^{\tau_p} dt n_{i,j}(t) , \quad (2.2.39a)$$

$$\eta^{(2a)} := \sum_j \lambda_j [\mathcal{H}_b, A_j] \int_0^{\tau_p} dt t n_{i,j}(t) , \quad (2.2.39b)$$

$$\eta^{(2b)} := \sum_{l,m} \lambda_l \lambda_m (A_l A_m + A_m A_l) \quad (2.2.39c)$$

$$\times \int_0^{\tau_p} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} n_{j,l}(t_1) n_{k,m}(t_2) \quad \text{und}$$

$$\eta^{(2c)} := \sum_{i;j < k} \lambda_j \lambda_k [A_j, A_k] \times \quad (2.2.39d)$$

$$\times \int_0^{\tau_p} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 (n_{i,j}(t_1) n_{i,k}(t_2) - n_{i,j}(t_2) n_{i,k}(t_1)) .$$

Sollten die Komponenten von \vec{A} kommutieren, ist $\eta^{(2c)}$ gleich Null (siehe (2.2.39d)). Dann muss diese Gleichung nicht mehr Null gesetzt werden, da sie von vornherein wegfällt.

2.2.1.3. Diskussion der Gleichungen

Die Approximation eines idealen Pulses (z.B: eines δ -Pulses) durch einen ausgedehnten Puls $\vec{v}(t)$ in dritter Ordnung in t gelingt durch Wahl der Pulsparameter $\vec{v}(t)$ so, dass die Beiträge $\eta^{(1)}$ und $\eta^{(2)}$ (Gleichung (2.2.34)) verschwinden, d.h.

$$\int_0^{\tau_p} dt n_{i,j}(t) = 0 \quad \forall i, j \in \{x, y, z\} \quad (2.2.40a)$$

$$\int_0^{\tau_p} dt t n_{i,j}(t) = 0 \quad \forall i, j \in \{x, y, z\} \quad (2.2.40b)$$

$$\iint_0^{\tau_p} dt_1 dt_2 \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} n_{j,l}(t_1) n_{k,m}(t_2) \operatorname{sgn}(t_1 - t_2) = 0 \quad \forall i; l \leq m \quad (2.2.40c)$$

$$\sum_i \iint_0^{\tau_p} dt_1 dt_2 n_{i,j}(t_1) n_{i,k}(t_2) \operatorname{sgn}(t_1 - t_2) = 0 \quad \text{für } j < k \quad {}^{14} \quad (2.2.40d)$$

Im allgemeinsten Fall, in dem die Kopplungsoperatoren A_l und der Hamiltonoperator des Bades \mathcal{H}_b nicht weiter spezifiziert sind, erhalten wir insgesamt 39 Integralgleichungen. Die zugrundeliegende Zahl möglicher Indexkombinationen wird in Tabelle 2.4 diskutiert. Genauere Kenntnis der Systemparameter kann die Anzahl der zu lösenden Gleichungen jedoch erheblich reduzieren.

¹⁴Der Fall $j < k$ impliziert z.B. $(j, k) = (x, y)$, $(j, k) = (x, z)$ und $(j, k) = (y, z)$.

Gleichung	Kombinationen	Anzahl
(2.2.40a)	$(ij) = (xx), (xy), (xz), (yx), \dots$	9
(2.2.40b)	$(ij) = (xx), (xy), (xz), (yx), \dots$	9
(2.2.40c)	$(ilm) = (xxx), (xxy), (xxz), (xyy), (xyz), (xzz), (yxx)$ \dots	$3 \times 6 = 27$
(2.2.40d)	$(jk) = (xy), (xz), (yz)$	3
		$\Sigma = 39$

Tabelle 2.4 Analyse der möglichen Indexkombinationen zu Gleichung (2.2.40) und der daraus resultierenden Zahl an Gleichungen, die es bei Unkenntnis des Systems zu lösen gilt.

Betrachtet man z.B. nur eine Kopplung in z -Richtung, liefert Gleichung (2.2.40d) keinen Beitrag und (2.2.40c) liefert nur drei Gleichungen. Der Fall $[\mathcal{H}_b, \vec{A}] = 0$ würde automatisch Gleichung (2.2.40b) erfüllen.

An dieser Stelle sei nochmals darauf hingewiesen, dass der gewählte Ansatz (2.2.1) sich unter anderem dadurch auszeichnet, dass nach dem Puls keine weitere freie Evolution folgt. Das heißt die Wirkung des Pulses entfaltet sich – im Rahmen der gemachten Entwicklung – direkt am Ende des Intervalls $[0, \tau_p]$. Experimentell bedeutet dies, dass die Antwort des Systems direkt ohne Wartezeit gemessen werden kann.

Weiterhin ist es nun möglich, π -Pulse auch in zweiter Ordnung zu annihilieren, was in unserem ersten Vorschlag (s. Kapitel 2.1.4.3) nicht möglich ist.

Möchte man höhere Ordnungen (konkret die dritte Ordnung) optimieren, muss man Beiträge proportional zu $\omega\lambda^2$, $\omega^2\lambda$ oder λ^3 berücksichtigen. Diese Beiträge liefern im allgemeinen Fall – also unbekanntem \vec{A} und \mathcal{H}_b – eine große, aber endliche, Zahl an weiteren Gleichungen, die sich nur mit großem numerischen Aufwand und entsprechend komplexen Pulsstrukturen lösen ließen. Selbst das Aufstellen dieser Gleichungen bedarf einiger Anstrengung, da nun deutlich mehr Terme zu der entsprechenden Ordnung beitragen. Nichtsdestotrotz ist dies kein prinzipielles Problem.

Die gefundenen Korrekturen können geometrisch interpretiert werden, da die $n_{i,j}$ sich als Matrixelemente der Rotationsmatrix $D_{\vec{a}}(-\psi)$ ergeben. Die Gleichungen (2.2.40) stellen daher die zeitliche Mittelung über alle möglichen Rotationen des Kopplungsterms zwischen Qubit und Bad des Hamiltonoperators (2.2.2) dar. Besonders gut sieht man dies in der Gleichung der linearen Ordnung (2.2.38a). Die Gleichungen der zweiten Ordnung (2.2.40b, 2.2.40c, 2.2.40d) interpretiert man als gewichtetes Mittel der $n_{i,j}$. Für den Fall reiner z -Kopplung liefert (Pasini et al. 2009) eine anschauliche geometrische Interpretation.

Da die $n_{i,j}$ durch Gleichung (2.2.25) als Elemente der Drehmatrix $D_{\vec{a}}(-\psi)$ aufgefasst werden können, können die Gleichungen (2.2.40) als das Zeitmittel über alle möglichen Rotationen des Kopplungsterms \vec{A} interpretiert werden. Dies kann man unter anderem an Gleichung (2.2.36) ablesen.

Die Gleichungen der zweiten Ordnung (2.2.40b) bis (2.2.40d) können analog als gewichtete Mittelwerte der $n_{i,j}$ gesehen werden. Ist nur die Kopplung in z -Richtung A_z präsent, so können diese Gleichungen als dreidimensionale Vektorgleichungen formuliert werden (siehe Pasini & Uhrig 2008).

2.2.2. Optimierte Pulse

Zur Demonstration untersuchen wir einen einfachen Spezialfall. Wieder benutzen wir das erste Modell (2.1.1), welches nur in z -Richtung ankoppelt, in dem also

$$\vec{A} = \lambda A (0, 0, 1)^\top \quad (2.2.41a)$$

gilt. Die Drehung soll lediglich um die y -Achse

$$\hat{a} = (0, 1, 0)^\top \quad (2.2.41b)$$

erfolgen. Damit vereinfacht sich \vec{n}_A zu

$$\vec{n}_A := \vec{n}^z = \lambda A (-\sin \psi(t), 0 \cos \psi(t)) . \quad (2.2.41c)$$

Dies setzt man nun in das Gleichungssystem (2.2.40) ein und erhält die folgenden zu erfüllenden Gleichungen

$$\eta_{11} := \int_0^{\tau_p} dt \sin \psi(t) , \quad (2.2.42a)$$

$$\eta_{12} := \int_0^{\tau_p} dt \cos \psi(t) , \quad (2.2.42b)$$

$$\eta_{21} := \int_0^{\tau_p} dt t \sin \psi(t) , \quad (2.2.42c)$$

$$\eta_{22} := \int_0^{\tau_p} dt t \cos \psi(t) \quad \text{und} \quad (2.2.42d)$$

$$\eta_{23} := \iint_0^{\tau_p} dt_1 dt_2 \sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) \operatorname{sgn}(t_1 - t_2) . \quad (2.2.42e)$$

Der erste Index repräsentiert die Ordnung, der zweite ist eine willkürlich gewählte Nummerierung. Hier sieht man auch, welche drastische Reduktion das Gleichungssystem (2.2.40) von maximal 39 Gleichungen erfahren kann, wenn das System näher spezifiziert werden kann.

Wie auch im vorherigen Abschnitt 2.1.4 wurden die Lösungen des vereinfachten Gleichungssystems (2.2.42) mit Hilfe von Maple und anderer Software numerisch bestimmt. Dabei gelten die gleichen Hinweise wie auch in Abschnitt 2.1.4.

Man beachte, dass die so gefundenen Pulse einem anderen Zweck, nämlich

$$U_p(\tau_p, 0) \approx \mathbf{e}^{-i\tau_p \mathcal{H}_b} \hat{P}_\theta , \quad ((2.2.1))$$

als die Pulse aus 2.1.4, nämlich

$$U_p(\tau_p, 0) = u_p(\tau_p, \tau_s) \hat{P}_\theta u_p(\tau_s, 0) , \quad ((2.1.9))$$

dienen auch wenn die neuen Gleichungen (2.2.42) denen des ersten Ansatzes (2.1.38) sehr ähneln.

Wieder suchen wir in erster Linie nach stückweise konstanten π - und $\pi/2$ -Pulsen. Zur Optimierung der ersten Ordnung, finden wir unter anderem die schon aus Abschnitt 2.1.4.5 und (Cummins & Jones 2000) bekannten CORPSE- und SCORPSE-Sequenzen.

Dies ist einerseits der große Ähnlichkeit der zugrunde liegenden Gleichungssysteme (2.1.39) und (2.2.40) zuzuschreiben. Andererseits hat sicherlich auch die inhaltliche Nähe der Zielsetzung aus Gleichung (2.2.1) zu der von Cummins et al. Einfluss auf diese Übereinstimmung.

Dass diese Pulse in unterschiedlichen Szenarien auftreten zeigt deutlich, welche hohen Werte CORPSE und SCORPSE für experimentelle Anwendungen aufweisen können.

Weitere Ergebnisse optimierter Pulse sind in den Tabellen 2.5 bis 2.8 aufgelistet, in den Abbildungen 2.6 bis 2.9 finden sich die entsprechenden Abbildungen der Pulse. Um auch hier einen Vergleich der Pulsamplituden v_{\max} durchführen zu können, werden diese explizit in Abbildung 2.10 dargestellt. Anders als in Abbildung 2.5 wurden hier auch Pulse mit sehr hohen Amplituden generiert. Ob diese tatsächlich sinnvoll eingesetzt werden können, hängt stark vom jeweiligen experimentellen Aufbau ab.

Es wurden auch stetige Pulse gesucht und gefunden, da diese aber nicht Gegenstand der folgenden numerischen Untersuchungen sind, verweise ich hierzu lediglich auf die zugehörige Referenz (Pasini et al. 2009).

# Segmente	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
SGLPi (SGL1)			Abb. 2.2b
1	$\tau_1 = 1$	π	$\eta_{11} = 0.63662$ $\eta_{12} = 0$
Pi-CORPSE (asymm)			Abb. 2.6a
3	$\tau_1 = 1/13$ $\tau_2 = 5/13$ $\tau_3 = 7/13$	$\pm \frac{13}{6} \pi$	$\eta_{21} = 0.03390$ $\eta_{22} = -0.05973$ $\eta_{23} = -0.00174$
Pi-SCORPSE (symm)			Abb. 2.6b
3	$\tau_1 = 1/7$ $\tau_2 = 5/7$ $\tau_3 = 1/7$	$\pm \frac{7}{6} \pi$	$\eta_{21} = 0$ $\eta_{22} = -0.20599$ $\eta_{23} = 0.12293$
Pi-Symm			Abb. 2.6c
3	$\tau_1 = 0.2941176471$ $\tau_2 = 0.4117647058$ $\tau_3 = 0.2941176471$	± 8.901179179	$\eta_{21} = 0$ $\eta_{22} = 0.03375$ $\eta_{23} = 0.02084$

Tabelle 2.5 Tabelle der π -Pulse. Neben den Namen der Pulse sind die Referenzen zu den zugehörigen Abbildungen angegeben. Die erste Spalte (# Segmente) gibt die Zahl der Segmente an; die Spalte Dauern gibt die Zeitintervalle der einzelnen Pulssegmente an in Einheiten der Gesamtpulsdauer τ_p an; Ampl. gibt die Amplitude des jeweiligen Segments an in Einheiten von τ_p^{-1} ; Es wurden jeweils die η_{ij} (Gleichung (2.2.42)) der ersten nichtverschwindenden Ordnung angegeben, die Einheit ist dabei τ_p^{-i} . Die Pulse SGLPi und CORPSEPi wurden bereits in Tabelle 2.1 vorgestellt. Allerdings unterscheiden sich die η_{ij} aufgrund der geänderten Zielsetzung der Pulse (Gleichung (2.1.9)).

# Segmente	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
SGLPi2			Abb. 2.3b
1	$\tau_1 = 1$	$\pi/2$	$\eta_{11} = 0.6366$ $\eta_{12} = 0.6366$

# Segmente	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
Pi2-CORPSE			Abb. 2.8a
3	$\tau_1 =$ 0.033 410 109 91	$\pm 6.345\ 849\ 259$	$\eta_{21} =$ 0.0320
	$\tau_2 =$ 0.438 117 174 59		$\eta_{22} =$ 0.0070
	$\tau_3 =$ 0.528 472 715 50		$\eta_{23} =$ -0.0005
Pi2-SCORPSE			Abb. 2.8b
3	$\tau_1 =$ 0.066 166 836 30	$\pm 1.068\ 085\ 525$	$\eta_{11} =$ 0.5907
	$\tau_2 =$ 0.867 666 327 0		$\eta_{12} =$ 0.5907
	$\tau_3 =$ 0.066 166 836 70		
Pi2-Symm			Abb. 2.8c
3	$\tau_1 =$ 0.275 201 069 7	$\pm 7.791\ 317\ 719$	$\eta_{21} =$ -0.0661
	$\tau_2 =$ 0.449 597 860 60		$\eta_{22} =$ 0.0661
	$\tau_3 =$ 0.275 201 069 7		$\eta_{23} =$ 0.0215

Tabelle 2.6 Tabelle der $\pi/2$ -Pulse. Zur Spaltenerklärung siehe Tabelle 2.5.

# Segmente	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
Pi-Symm-2nd			Abb. 2.7a
5	$\tau_1 =$ 0.016 130 303 72	$\pm 9.403\ 984\ 100$	$\eta_{23} =$ 0.0183
	$\tau_2 =$ 0.291 758 798 98		
	$\tau_3 =$ 0.384 221 794 6		
	$\tau_4 =$ 0.291 758 798 98		
	$\tau_5 =$ 0.016 130 303 72		
Pi-Symm-2ndB			Abb. 2.7b
7	$\tau_1 =$ 0.0702	$\pm 85.517\ 804\ 0$	$\eta_{23} =$ -0.000 31
	$\tau_2 =$ 0.192 989 637 1		
	$\tau_3 =$ 0.175 207 984 5		
	$\tau_4 =$ 0.123 204 756 8		
	$\tau_5 =$ 0.175 207 984 5		
	$\tau_6 =$ 0.192 989 637 1		
	$\tau_7 =$ 0.0702		
Pi-Symm-2ndC			Abb. 2.7c
7	$\tau_1 =$ 0.050 019	$\pm 188.565\ 690\ 600$	$\eta_{23} =$ -1.5×10^{-6}
	$\tau_2 =$ 0.165 879 636 1		
	$\tau_3 =$ 0.202 063 558 5		
	$\tau_4 =$ 0.164 075 610 8		
	$\tau_5 =$ 0.202 063 558 5		
	$\tau_6 =$ 0.165 879 636 1		
	$\tau_7 =$ 0.050 019		

# Segmente	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
Pi-Asymm-2nd			Abb. 2.7d
6	$\tau_1 = 0.252011$ $\tau_2 = 0.0588850$ $\tau_3 = 0.2738850$ $\tau_4 = 0.1680440$ $\tau_5 = 0.0432140$ $\tau_6 = 0.2039610$	± 11.364434000	$\eta_{21} = 2.0 \times 10^{-7}$ $\eta_{22} = -1.8 \times 10^{-6}$
Pi-Symm-3rd			Abb. 2.7e
5	$\tau_1 = 0.0228054552$ $\tau_2 = 0.252463762$ $\tau_3 = 0.449461565$ $\tau_4 = 0.252463762$ $\tau_5 = 0.0228054552$	± 10.9501204 -7.69537638	$\eta_{3\dots} = ??$

Tabelle 2.7 Tabelle der π -2nd-Pulse. Zur Spaltenerklärung siehe Tabelle 2.5. Zusätzlich sind die numerisch berechneten Koeffizienten η_{ij} (s. Gleichung (2.2.42)) soweit angegeben, die nicht aufgeführten Werte entsprechen im Rahmen der numerischen Genauigkeit Null. Der Puls Pi-Symm-3rd optimiert sogar bis hin zur dritten Ordnung, deren Koeffizienten η_{3j} aber nicht analytisch zugänglich sind.

# Segmente	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
Pi2-Symm-2nd			Abb. 2.9a
5	$\tau_1 = 0.1388435481$ $\tau_2 = 0.2541674326$ $\tau_3 = 0.2139780386$ $\tau_4 = 0.2541674326$ $\tau_5 = 0.1388435481$	± 47.115230	$\eta_{23} = -3.0 \times 10^{-6}$

# Segmente	Dauern τ_i [τ_p]	Ampl. [τ_p^{-1}]	η_{ij} [τ_p^{-i}]
Pi2-Symm-2ndB			Abb. 2.9b
7	$\tau_1 = 0.060\ 18$ $\tau_2 = 0.152\ 692\ 696\ 8$ $\tau_3 = 0.192\ 945\ 579\ 8$ $\tau_4 = 0.188\ 363\ 446\ 8$ $\tau_5 = 0.192\ 945\ 579\ 8$ $\tau_6 = 0.152\ 692\ 696\ 8$ $\tau_7 = 0.060\ 18$	$\pm 62.820\ 198$	$\eta_{23} = 0.000\ 13$
Pi2-Symm-2ndC			Abb. 2.9c
7	$\tau_1 = 0.039\ 828\ 7$ $\tau_2 = 0.155\ 558\ 656\ 6$ $\tau_3 = 0.210\ 993\ 318\ 1$ $\tau_4 = 0.187\ 238\ 650\ 6$ $\tau_5 = 0.210\ 993\ 318\ 1$ $\tau_6 = 0.155\ 558\ 656\ 6$ $\tau_7 = 0.039\ 828\ 7$	$\pm 238.862\ 82$	$\eta_{23} = -3.0 \times 10^{-6}$
Pi2-Asymm-2nd			Abb. 2.9d
6	$\tau_1 = 0.231\ 411\ 0$ $\tau_2 = 0.053\ 212\ 0$ $\tau_3 = 0.254\ 965\ 0$ $\tau_4 = 0.192\ 551\ 0$ $\tau_5 = 0.047\ 583\ 0$ $\tau_6 = 0.220\ 278\ 0$	$\pm 11.563\ 810$	$\eta_{22} = -1.8 \times 10^{-6}$

Tabelle 2.8 Tabelle der $\pi/2$ -2nd-Pulse. Zur Spaltenerklärung siehe Tabelle 2.5. Zusätzlich sind die numerisch berechneten Koeffizienten $\eta^{(2)}$ (s. Gleichung (2.2.42)) soweit verfügbar angegeben.

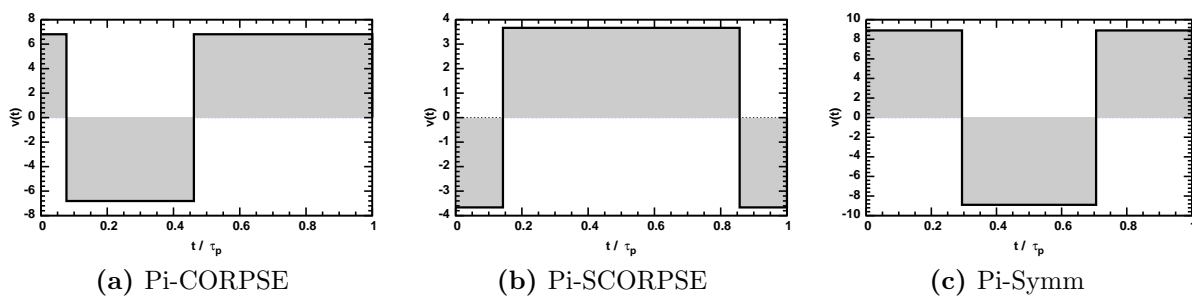


Abbildung 2.6 Grafische Darstellung der π -Pulse zu Tabelle 2.5.

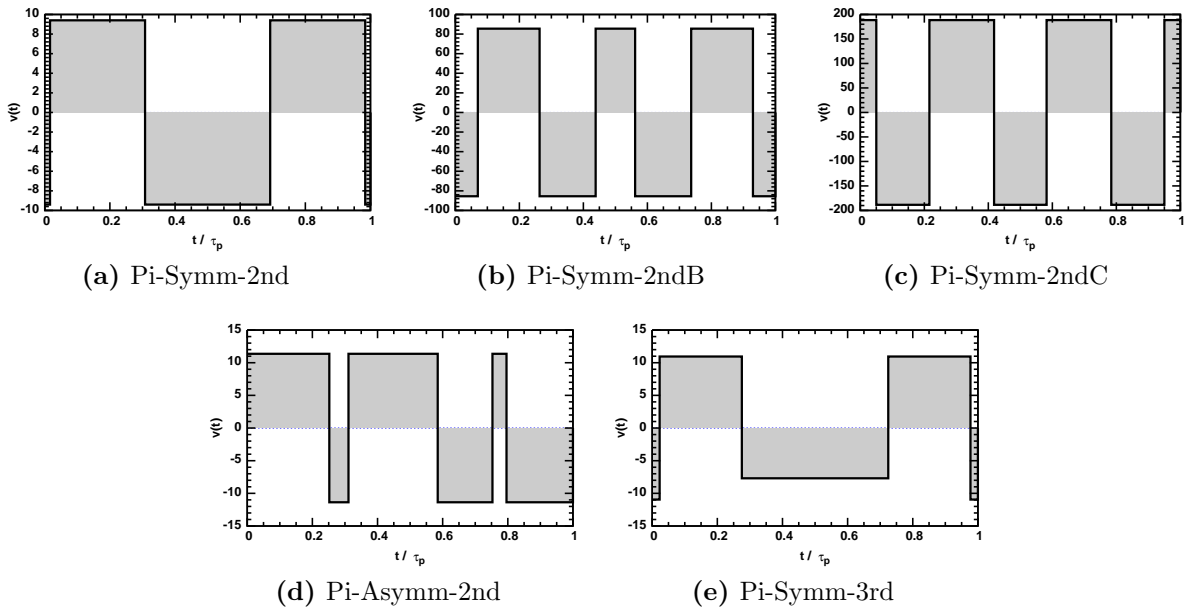


Abbildung 2.7 Grafische Darstellung der π -Pulse zu Tabelle 2.7.

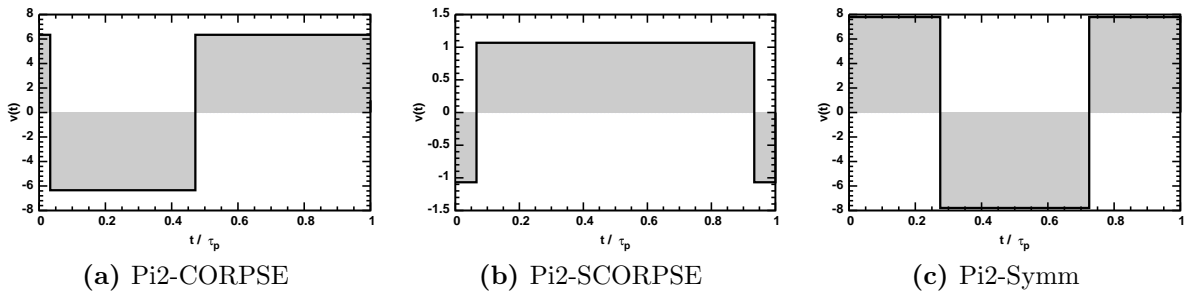


Abbildung 2.8 Grafische Darstellung der $\pi/2$ -Pulse zu Tabelle 2.6.

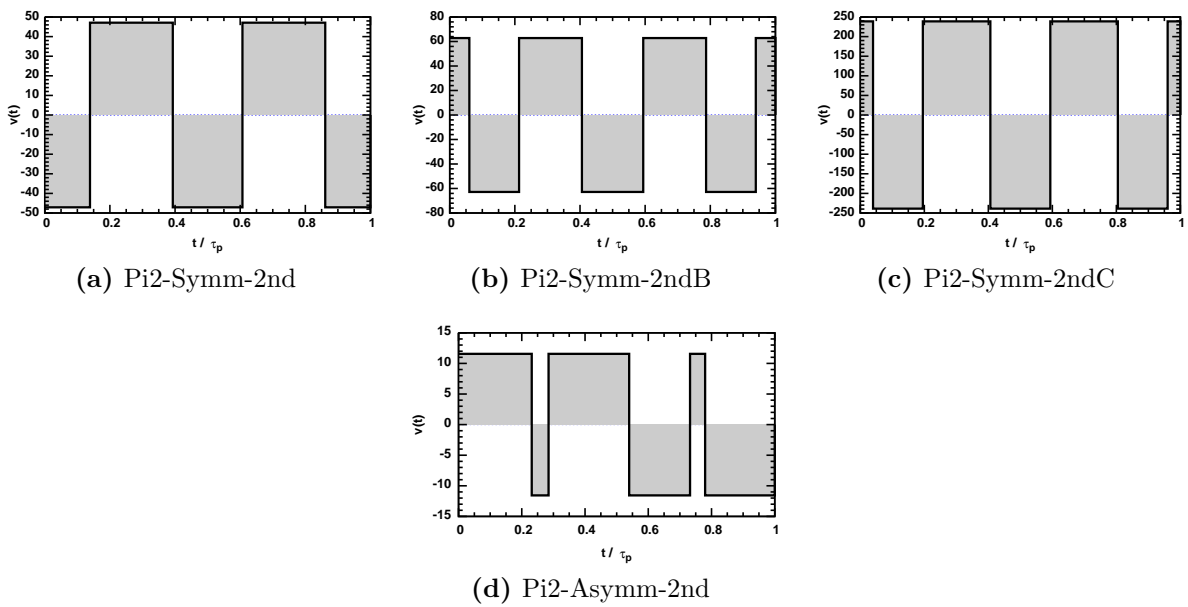


Abbildung 2.9 Grafische Darstellung der $\pi/2$ -Pulse zu Tabelle 2.8.

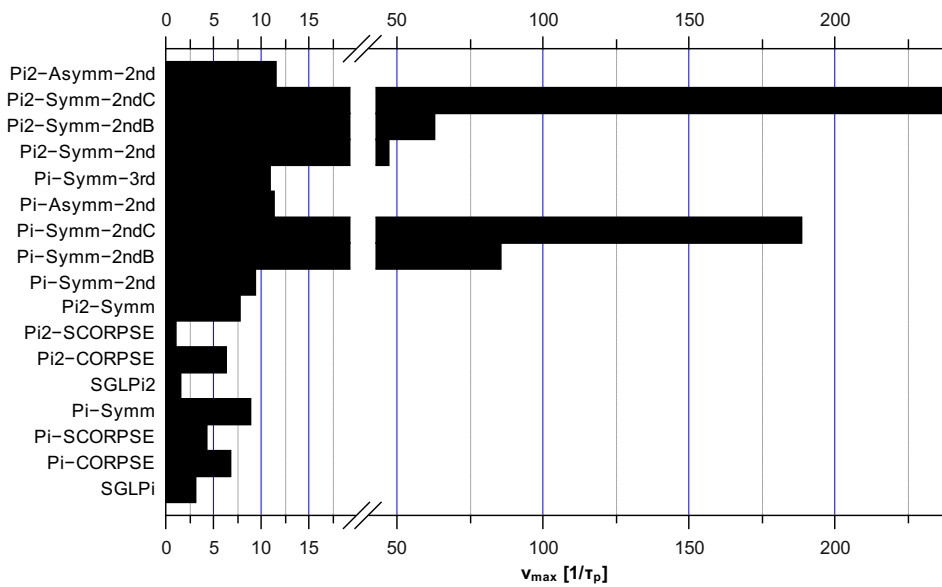


Abbildung 2.10 Es werden die maximalen Pulsamplituden v_{\max} gemäß der Tabellen 2.5 bis 2.8 miteinander verglichen. Man erkennt, dass v_{\max} starken Schwankungen unterliegt und teilweise sehr große Werte annimmt.

3. Numerische Analysen

Wichtige Arbeit

Karbach et al. 2008

KARBACH, P. ; PASINI, S. ; UHRIG, G. S.: Numerical analysis of optimized coherent control pulses. In: **Phys. Rev. A** 78 (2008), Nr. 2, 022315. – DOI 10.1103/PhysRevA.78.022315

3.1. Allgemeines

In den folgenden Abschnitten werden verschiedene numerische Ergebnisse hinsichtlich der analytischen Arbeiten (Pasini et al. 2008) und (Pasini et al. 2009) dargestellt¹. Ein Teil der Ergebnisse wurde bereits veröffentlicht (siehe Karbach et al. 2008).

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen der später vorgestellten numerischen Analysen gelegt. Außerdem werden hier die später gebräuchlichen Begriffe zur Abgrenzung einzelner Methoden und Zielsetzungen eingeführt.

Die Verwendung **stückweise konstanter Pulse** ermöglicht es, die zeitliche Propagation des Systems numerisch exakt zu berechnen. Der Zeitentwicklungoperator

$$U_{\text{TP}}(\tau_p, 0) = \mathcal{T} \left[\exp \left(-i \int_0^{\tau_p} \mathcal{H}_0(t) dt - i \mathcal{H} \tau_p \right) \right] \quad (3.1.1a)$$

$$= \prod_i^{\# \text{ pulses}} \exp \left[-i \left(\mathcal{H}_0^{(i)} - \mathcal{H} \right) \Delta t_i \right] \quad (3.1.1b)$$

$$= \mathbf{e}^{-i(\mathcal{H}_0^{(1)} - \mathcal{H})\Delta t_1} \cdot \mathbf{e}^{-i(\mathcal{H}_0^{(2)} - \mathcal{H})\Delta t_2} \dots \quad (3.1.1c)$$

des Gesamtsystems unter Einwirkung des (realen) Pulses $U_{\text{TP}}(\tau_p, 0)$ mit stückweise konstanten Feldamplituden v_i

$$\mathcal{H}_0^{(i)} = v_i \sigma_y \quad (3.1.2)$$

ergibt sich als Produkt der einzelnen Zeitentwicklungsoperatoren im Segment Δt_i der Wirksamkeit des applizierten Pulses. Die Summe der Δt_i

$$\sum_i^{\# \text{ pulses}} \Delta t_i = \tau_p \quad (3.1.3)$$

ergibt dabei die Gesamtdauer des Pulses τ_p . Die Pulsbestandteile und die Benennung der einzelnen Größen sind in Abbildung 3.1 für einen dreikomponentigen Puls skizziert.

Eine wesentliche Funktion der erstellten Simulationsprogramme ist daher die Berechnung der Matrixexponentiale für jeden Pulsabschnitt und deren anschließende Multiplikation. Die technischen Einzelheiten der Matrizenexponentiation werden in Anhang B.1.1 diskutiert. In den meisten präsentierten Fällen wird die Exponentialfunktion über die Exponentiale der Eigenwerte der

¹Siehe Kapitel 2.1 und 2.2

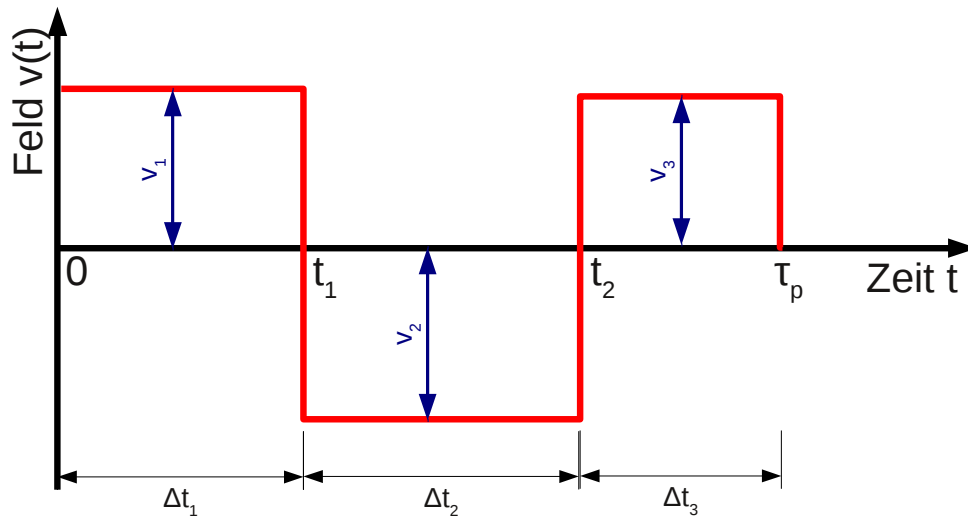


Abbildung 3.1 Skizze eines dreikomponentigen Pulses zur Veranschaulichung der Größen v_i , t_i und Δt_i , die die analysierten Pulse charakterisieren.

einzelnen Propagationsoperatoren/-matrizen $e^{-i\cdots}$ und der anschließenden Rücktransformation berechnet. Die Multiplikation der Matrixexponentiale erfolgt anschließend mit Hilfe der optimierten Produktfunktionen (`prod`) der Boost-Bibliothek (Boost.org 2009).

Um später die Güte der optimierten Pulse zu testen, ist es notwendig, ein Abstandsmaß/eine Norm zu finden, die es erlaubt, die tatsächliche Zeitentwicklung unter Wirkung des Pulses (realer Pulse) mit dem gewünschten Ziel – also dem idealen Puls – zu vergleichen. Im ersten Schritt wird die Differenzmatrix

$$\Delta := U_{ip} - U_{rp} \quad (3.1.4)$$

mit U_{ip} als Propagator des idealen Pulses und U_{rp} als Propagator des realen Pulses definiert. Die Zielsetzungen der in Abschnitt 2.1 und 2.2 vorgestellten Rechnungen lauten

$$U_{ip}(\tau_p, 0) = U_p(\tau_p, \tau_s) \hat{P}_\theta U_p(\tau_p, 0) \quad (2.1.9)$$

und

$$U_{ip}(\tau_p, 0) = e^{-i\tau_p \mathcal{H}_b} \hat{P}_\theta . \quad (2.2.1)$$

Um das Lesen und Verstehen des vorliegenden Textes im Folgenden zu vereinfachen, werden Gleichung (2.1.9) und die damit zusammenhängenden Rechnungen und Analysen aus Abschnitt 2.1 mit einer römischen I gekennzeichnet; Gleichung (2.2.1) und die Pulse aus 2.2 analog mit römisch II. An manchen Stellen wird auch von „alten“ und „neuen“ Pulsen gesprochen, auch dies bezieht sich auf die Zielsetzungen I und II.

Die durch konsequente Lösung der Schrödingergleichung und Nutzung der Magnusentwicklung

aufgestellte Korrekturmatrix²

$$U_F(\tau_p, 0) = \exp \left[-i \left(\eta^{(1)} + \eta^{(2)} + \dots \right) \right] \quad (3.1.5)$$

und Δ stehen in engem Zusammenhang zueinander

$$\Delta = U_F - \mathbb{1} . \quad (3.1.6)$$

Zur quantitativen Analyse muss der Matrix Δ ein skalarer Wert – also eine Norm – zugeordnet werden. Es wurde die als 2-Norm bezeichnete

$$d := \sqrt{\max(\text{EigenValue}[\Delta^\dagger \Delta])} \quad (3.1.7)$$

gewählt³. Zuerst wird der größte Eigenwert der hermiteschen Matrix $\Delta^\dagger \Delta$ bestimmt. Von diesem wird anschließend die Quadratwurzel gebildet⁴.

Im bestmöglichen Fall, also der vollen Übereinstimmung von Ziel (idealer Puls) und Simulation (realer Puls)

$$U_{ip} = U_{rp} \quad \Rightarrow \quad \Delta = 0 \quad (3.1.8)$$

beträgt das Abstandsmaß

$$d_{\min} = 0 . \quad (3.1.9)$$

Im „schlimmsten“ Fall hingegen erhält man die obere Grenze des Abstandsmaßes über

$$\Delta \Delta^\dagger = \mathbb{1} + \mathbb{1} - 2\Re(U_{ip} U_{rp}^\dagger) . \quad (3.1.10)$$

Im Falle, dass U_{ip} und U_{rp} „orthogonal“ zueinander stehen beträgt

$$d_{\max} = 2 , \quad (3.1.11)$$

was der oberen Grenze des Abstandsmaßes entspricht.

3.1.1. Potenzreihenentwicklung

Die Ergebnisse der Magnusentwicklung aus den Abschnitten 2.1 respektive 2.2, bedingen die vergleichsweise aufwendige Berechnung von Matrixexponentialen⁵ wie Gleichung (3.1.5).

Daher liegt es nahe, statt der vollen Magnusentwicklung diese weiter zu vereinfachen, so dass ein erster Vergleich zwischen Theorie und Simulation leichter fällt. Dazu bietet es sich an, die jeweils führende Ordnung des Ausdrucks (3.1.5)

$$U_F(\tau_p, 0) = \exp \left[-i \left(\eta^{(1)} + \eta^{(2)} + \dots \right) \right] \quad (3.1.12a)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i \sum_{i=1}^{\infty} \eta^{(i)} \right)^n \quad (3.1.12b)$$

$$\approx \mathbb{1} - i \left(\eta^{(1)} + \eta^{(2)} + \dots \right) \quad (3.1.12c)$$

²Eigentlich Korrekturmatrizen, da die Operatoren $\eta^{(i)}$ sich für die unterschiedlichen Zielsetzung (2.1.9) und (2.2.1) unterscheiden und lediglich die gemeinsame Struktur teilen.

³Aufgrund der Nutzung der Eigenwerten wird häufig auch von spektraler Norm gesprochen.

⁴Die Hermitizität von $\Delta^\dagger \Delta$ ist hierfür essentiell erforderlich. Ansonsten versagte diese Normdefinition.

⁵Die Entwicklungskoeffizienten/-operatoren unterscheiden sich dabei zwischen den betrachteten Zielsetzungen (Gleichungen (2.1.9) und (2.2.1)).

zu entwickeln. Für die Differenzmatrix Δ ergibt sich nach Gleichung (3.1.6) damit

$$\Delta \approx -i \left(\eta^{(1)} + \eta^{(2)} + \dots \right) . \quad (3.1.13)$$

Das Produkt $\Delta^\dagger \Delta$ kann so, für die Fälle in denen die führende Ordnung bekannt ist, vereinfacht – verglichen mit der Magnusentwicklung (3.1.5) – als Potenzgesetz genähert und berechnet werden.

Für den Fall, dass die erste Ordnung **nicht** verschwindet, ergibt sich

$$d_{\text{linear}} \approx \sqrt{\max(\text{EigenValue}[\eta^{(1)}\eta^{(1)}]) + \mathcal{O}(\tau_p^3)} = \mathcal{O}(\tau_p) . \quad (3.1.14a)$$

Im Falle von Pulsen, die die erste Ordnung ($\eta^{(1)} = 0$) optimieren, ergibt sich

$$d_{2\text{nd}} \approx \sqrt{\max(\text{EigenValue}[\eta^{(2)}\eta^{(2)}]) + \mathcal{O}(\tau_p^5)} = \mathcal{O}(\tau_p^2) . \quad (3.1.14b)$$

Um diese unterschiedlichen Entwicklungsschritte – also Gleichung (3.1.7) verglichen mit (3.1.14a) und (3.1.14b) – sprachlich voneinander abzugrenzen, wird im Folgenden in Bezug zu Gleichung (3.1.7) von **Magnusentwicklung** oder **voller Entwicklung** gesprochen; die Gleichungen (3.1.14a) und (3.1.14b) hingegen werden mit **Potenzreihenentwicklung** oder **Asymptotik** bezeichnet.

Man beachte, dass die Gleichungen (3.1.14a) und (3.1.14b) aus der Reihenentwicklung der Exponentialfunktion (Gleichung (3.1.5)) entstammen. Diese Ausdrücke des Abstandsmasses d der Potenzreihenentwicklung sind – anders als die ursprüngliche Magnusentwicklung – nicht beschränkt. Bei naiver Benutzung der Formeln können hier also Werte $d > 2$ auftreten, was gemäß Gleichung (3.1.11) ausgeschlossen ist und lediglich ein Artefakt der Potenzreihenentwicklung darstellt.

Die jeweils führende Ordnung dieser beiden Formeln erhält man unter Berücksichtigung von $\eta^{(1)} = \mathcal{O}(\tau_p)$ und $\eta^{(2)} = \mathcal{O}(\tau_p^2)$.

In Anhang B finden sich Angaben zu Programmierung/Implementation, zu Optionen und Laufzeit/Speicherbedarf der angewandten Programme.

Darstellung der Ergebnisse

In den meisten der folgenden Abbildungen werden unterschiedliche Pulse hinsichtlich ihrer Abweichungen d von dem Verhalten eines idealen δ -förmigen Pulses untersucht. Obwohl die Ergebnisse der Abschnitte 2.1.1 und 2.2.1 auf einer Zeitentwicklung basieren, ist es möglich und sinnvoll, diese Ergebnisse gegen die Kopplungsstärke – meist den Kopplungsparameter Spin \leftrightarrow Bad λ aufzutragen.

Man erinnere sich, dass die eigentlichen dimensionslosen Entwicklungsparameter durch die Produkte λt bzw. ωt gegeben sind⁶. Daher bleibt es uns unbenommen, entweder die eine, oder die andere Größe zu variieren. Auch anschaulich kann man sich einfach verdeutlichen, dass die Situation einer schwachen Kopplung unter langer Pulsdauer der Situation starker Kopplung unter kurzer Pulswirkung entspricht.

Da es sich als praktikabler erwies, die Pulse einheitlich zu belassen und die Pulsdauer zu $\tau_p = 1$ zu wählen, werden im folgenden die Abweichungen vom Idealpuls d gegen die Kopplungsparameter – und hier meist gegen λ (Spin \leftrightarrow Bad) – aufgetragen.

⁶Vergleiche Abschnitt 2.1.2.

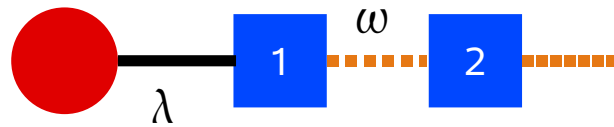


Abbildung 3.2 Skizze der Kettengeometrie zu (3.2.1). Der rote Kreis repräsentiert das Qubit, die blauen Quadrate die Badspins.

Um dabei eine einheitliche Energieskala zu gewährleisten, wird der Parameter $\alpha = \lambda/\omega$ genutzt.

Darüber hinaus muss auch ein Weg gewählt werden, der erlaubt, Pulse hoher Pulsamplitude mit solchen niedriger Amplitude zu vergleichen. Aufgrund dessen wird des öfteren der Kopplungsparameter λ zusätzlich mit der maximalen Feldamplitude v_m des jeweiligen Pulses skaliert.

3.2. Überblick der Modelle

3.2.1. Überblick zum Kettenmodell

Als erstes Modell zum Test der gefundenen optimierten Pulse wurde eine einfache Kettengeometrie gewählt. Der zugehörige Hamiltonoperator im rotierenden Koordinatensystem (rotating frame) hat dabei folgende Gestalt

$$\mathcal{H} = \sigma_z \underbrace{\lambda \sigma_z^{(1)}}_A + \omega \underbrace{\sum_{i=1}^n \vec{\sigma}^{(i)} \cdot \vec{\sigma}^{(i+1)}}_{\mathcal{H}_b} . \quad (3.2.1)$$

In Worten ist das untersuchte Zwei-Niveau-System (charakterisiert durch die Paulimatrizen ohne Index) über die z -Komponente an einen der Badspins gekoppelt. Das Bad selber interagiert über eine sogenannte J -Kopplung (s. Levitt 2005, Kapitel 7.10) der nächsten Nachbarn. Schematisch ist die Geometrie in Abbildung 3.2 dargestellt.

Die Wahl dieses Modells ist durch den Gedanken geprägt, ein einfaches aber dennoch relevantes System zu betrachten, um die Arbeiten des Kapitels 2 numerisch zu untersuchen. Aus der Vielzahl an möglichen Geometrien und Kopplungen eines Qubits an ein Bad ⁷ musste ein entsprechendes Modell aufgestellt werden.

Daher liegt die Wahl eines einzigen Kopplungspartners zwischen Qubit und Bad nahe. Um die Komplexität weiter zu reduzieren wurde – statt einer gerichteten Kopplung – lediglich die Kopplung der z -Komponenten angeführt. Im Grenzfall starker Felder erhält man diese Kopplung aus der J -Kopplung oder der Dipol-Dipol-Wechselwirkung (Fortunato et al. 2002).

Die interne Baddynamik darf aber nicht zu simpel gewählt werden, da ansonsten die Gefahr besteht, dass A und \mathcal{H}_b miteinander kommutieren und so die Pulsoptimierung schon durch das Modell selbst hinfällig wäre. Hier bot sich daher eine der J -Kopplung verwandte Formulierung an. Auch beschränken wir uns eine rein skalare Kopplung.

Derartige Systeme finden sich in der Natur unter anderem im Bereich der Flüssigkeits-NMR. Die Klasse der Kopplungen wird in diesem Kontext oft als J -Kopplung bezeichnet. Man unterscheidet

⁷Siehe die Übersicht in Abbildung 1.7 bzw. der zugehörigen Hamiltonoperatoren aus Tabelle 1.3

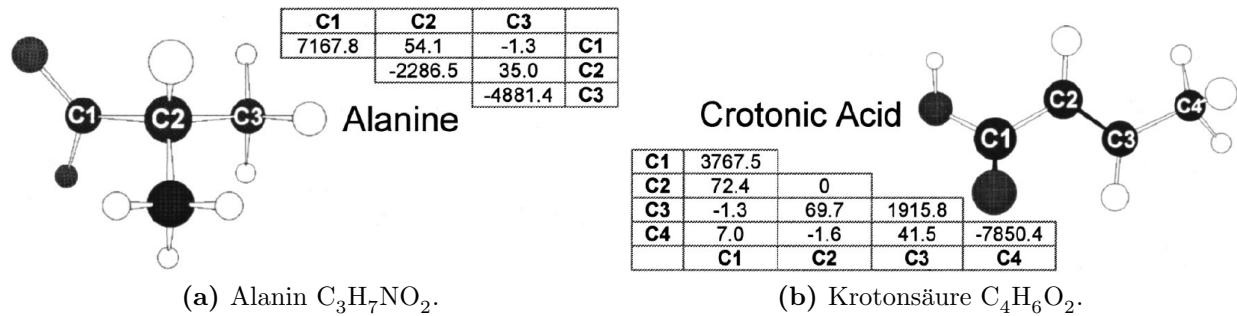


Abbildung 3.3 Darstellung zweier Moleküle, die homonukleare J -Kopplung zeigen. Die jeweiligen Tabellen geben dabei die Kopplungskonstanten und Resonanzfrequenzen an. Aus (Fortunato et al. 2002).

dabei isotrope und anisotrope, sowie homonukleare und heteronukleare Varianten (siehe Levitt 2005, Kapitel 7.10). Wendet man diese Sprache auf (3.2.1) an, so ist die Kopplung des Qubits an den ersten Badspin heteronuklear, wohingegen die Kopplung der Badspins untereinander homonuklear ist.

So zeigen zum Beispiel Alanin (Abbildung 3.3a) und Krotensäure (Abbildung 3.3b) in guter Näherung das homonukleare Verhalten und sind somit mögliche Kandidaten zum experimentellen Test, auch wenn die Kopplung an das Qubit – streng genommen – nicht heteronuklearer Natur ist. Weiterhin ist natürlich auch zu beachten, dass die Badspins nur idealisierterweise über die gleiche Konstante gekoppelt sind.

Aber auch Quantendots sind durch ähnliche Modelle beschreibbar. Hier verweise ich auf den Übersichtsartikel von Schliemann et al. aus dem Jahr 2003. Hier werden unter anderem die Ergebnisse verschiedener Arbeitsgruppe zur Spindynamik eines Elektronenspins, der über Hyperfeinwechselwirkung an Kernspin/Badspins koppelt, vorgestellt. Hauptsächlich wird dabei das Zeitverhalten der mittleren z -Komponente eines Zentralspins untersucht. Dabei wird festgestellt, dass viele der dargestellten approximativen Methoden nicht in der Lage sind, das volle System hinreichend genau genug zu beschreiben und daher neue universellere Methoden formuliert werden sollten. Im Gegensatz zur vorliegenden Arbeit, liegt der Fokus von Schliemann et al. hauptsächlich auf der Wechselwirkung eines Spins mit seiner Umgebung ohne die Wechselwirkung der Badspins untereinander eingehender zu betrachten.

Aber auch etliche andere Systeme weisen eine derartige „Heisenberg-artige“ Kopplungsstruktur auf. So findet man diesen oder ähnliche Kopplungstypen auch in anderen Festkörpersystemen, wie zum Beispiel in künstlich präparierten Mn-Atomen auf CuN (Hirjibehedin et al. 2006), bei Stickstoff-Fehlstellen-Zentren (Nitrogen Vacancies) in Diamant (Rios 2010) oder in mit Phosphor dotierten Silizium (Rong et al. 2011).

In unserem Ansatz wird auch davon ausgegangen, dass die angewandten Pulse nur auf den einzelnen Spin (das Qubit) wirken. Je nach chemischer Umgebung (chemische Verschiebung, Resonanzfrequenz), und verwendeter Apparatur (spektrale Pulsbreite, etc.) lässt sich diese Annahme nicht immer optimal erfüllen. Dennoch ist diese Annahme ein Ausgangspunkt, der in vielen System hinreichend gut genug erfüllt ist.

Dadurch, dass das Qubit lediglich an einen Spin des Bades koppelt, erwartet man keine große Abhängigkeit der Ergebnisse hinsichtlich der System-/Badgröße. Um einerseits die verwendeten Programme zu testen und andererseits diese Erwartung zu bestätigen, wurden dennoch unterschiedliche Systemgrößen miteinander verglichen. Dabei wurden keine unerwarteten Effekte festgestellt, d.h. es wurde keine unmittelbare Abhängigkeit zur Systemgröße gefunden.

Um aussagekräftige Ergebnisse zu erhalten, ist es weiterhin sinnvoll, die Skala der Kopplungskonstanten λ und ω festzulegen. Dies geschieht in den Rechnungen durch Einführung eines dimensionslosen Parameters α , so dass

$$\omega = \alpha\lambda \quad (3.2.2)$$

gilt.

Der Parameter α gibt dabei den Einfluss des Bades an, d.h. je größer α ist, desto weniger kann das Bad vernachlässigt werden.

Das eigentliche Ziel, die Optimierung hinsichtlich der Pulsdauer, ist dabei nur scheinbar in den Hintergrund getreten. Indem man die Pulslänge konstant belässt und lediglich die Kopplungsstärke variiert, erzielt man die gleichen Ergebnisse wie im umgekehrten Fall, da die Entwicklung in $\lambda\tau_p$ bzw. $\omega\tau_p$ geschieht. Dennoch vereinfacht sich dadurch die konkrete Implementierung.

Für optimierte Pulse, also solche, die mindestens die erste Ordnung verschwinden lassen, sind der Kommutator $[\mathcal{H}_b, A]$ und das Quadrat des Kopplungsoperators A^2 von großer Bedeutung. Dies gilt sowohl für die Betrachtungen aus Abschnitt 2.1 als auch für die aus 2.2. Beide Größen sind im Modell (3.2.1) leicht zu berechnen.

Das Quadrat des Kopplungsoperators

$$A^2 = \lambda^2 \left(\sigma_z^{(1)} \right)^2 = \lambda^2 \mathbb{1} \quad (3.2.3a)$$

erweist sich als überaus einfach. Aber auch

$$[\mathcal{H}_b, A] = \lambda\omega \left[\vec{\sigma}^{(1)} \vec{\sigma}^{(2)}, \sigma_z^{(1)} \right] = 2\lambda\omega i \left(-\sigma_y^{(1)} \sigma_x^{(2)} + \sigma_x^{(1)} \sigma_y^{(2)} \right) \quad (3.2.3b)$$

liefert keine größeren Probleme. Da hierbei nur insgesamt drei Spins (Qubit + 2 Badspins) Beiträge zum Kommutator liefern, ist die Darstellung von $\eta^{(1)}$ und $\eta^{(2)}$ (Gleichungen (2.1.38) bzw. (2.2.38)) in Matrizenform ($2^3 \times 2^3$) möglich und sinnvoll. Man erhält in der Basis der σ_z Eigenzustände, d.h.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.2.4a)$$

eine konkrete Darstellung der Operatoren aus (2.1.40) bzw. aus (2.2.34) und (2.2.38), nämlich

$$\eta^{(1)} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 0 & \eta_{12} & \eta_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_{11} & \eta_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \eta_{12} & \eta_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \eta_{11} & \eta_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta_{12} & \eta_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta_{11} & \eta_{12} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \eta_{12} & \eta_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \eta_{11} & \eta_{12} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.5a)$$

$$\eta^{(2)} = i \begin{pmatrix} 0 & -\eta_{23}\lambda^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \eta_{23}\lambda^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\eta_{23}\lambda^2 & 4\omega\lambda\eta_{22} & 4\omega\lambda\eta_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_{23}\lambda^2 & 0 & 4\omega\lambda\eta_{21} & -4\omega\lambda\eta_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -4\omega\lambda\eta_{22} & -4\omega\lambda\eta_{21} & 0 & -\eta_{23}\lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -4\omega\lambda\eta_{21} & 4\omega\lambda\eta_{22} & \eta_{23}\lambda^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\eta_{23}\lambda^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta_{23}\lambda^2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2.5b)$$

Die jeweiligen Eigenwerte dieser Matrizen lauten

$$\text{EigenValue} [\eta^{(1)}] = \pm \sqrt{\eta_{11}^2 + \eta_{12}^2} \lambda \quad (3.2.6a)$$

und

$$\text{EigenValue} [\eta^{(2)}] = \left\{ \pm \eta_{23}\lambda^2, \pm \sqrt{16\omega^2\eta_{21}^2 + 16\omega^2\eta_{22}^2 + \eta_{23}^2\lambda^2} \right\}. \quad (3.2.6b)$$

Die Vorzeichen \pm bezeichnen hier alle möglichen Kombinationen an Summen und/oder Differenzen. Schlussendlich werden nur die Extremalwerte zur Analyse herangezogen.

Man beachte, dass – wie erwartet – die Badgröße n bzw. die Systemgröße $N = n + 1$ im Rahmen dieser Näherung (zweite Ordnung) keinen wesentlichen Einfluss auf die betrachteten Kommutatoren (3.2.3a) und (3.2.3b) hat.

3.2.1.1. Abhängigkeit von der Systemgröße

Im vorangegangenen Abschnitt wurde angesprochen, dass aufgrund der Kopplungsgeometrie des betrachteten Kettenmodells die Systemgröße (bzw. die Badgröße) im Rahmen der gemachten Näherung keinen Einfluss auf die Ergebnisse haben sollte.

Um einerseits die Software zu testen und andererseits mögliche Effekte höherer Ordnung zu identifizieren, wird im Folgenden das Verhalten des Abstandsmasses d hinsichtlich der Badgröße n bzw. der Systemgröße $N = n + 1$ untersucht.

Dazu werden zwei Pulse (U1 und SGLPi) für unterschiedliche Größen $N = \{5, 7, 10\}$ in einem Kopplungsbereich $\lambda/v_m \approx 1 \times 10^{-3} \dots 1 \times 10^2$ jeweils mit sich selbst verglichen. Die Resultate sind in Abbildung 3.4 dargestellt.

Obwohl die Pulse vorerst nur mit sich selbst verglichen werden, d.h. die Daten nur mit der Systemgröße variiert werden, bietet es sich an schon jetzt die später erforderliche Skalierung des Kopplungsparameters λ vorzustellen.

Um später die unterschiedlichen Pulse mit ihren stark voneinander abweichenden Maximalamplituden (siehe Abbildungen 2.5 und 2.10) vernünftig miteinander vergleichen zu können, bietet sich die Skalierung des Kopplungsparameters λ mit eben dieser Maximalamplitude an, d.h.

$$\lambda \rightarrow \lambda/v_m \quad (3.2.7)$$

Durch die oben angesprochene feste Zeitskala der Pulse, und die übliche Wahl von $\hbar = 1$, besitzen beide Größen die Einheit einer Energie, so dass diese Skalierung auch ohne weitere physikalische Konstanten eine dimensionslose Größe ergibt.

Die Skalierung mit v_m ist nur eine von vielen Möglichkeiten. Sie ist gehört aber sicherlich zu den pragmatischen. Durch diese Wahl wird zudem verhindert, dass Pulse mit extrem hohen Amplituden⁸ besser erscheinen, als sie es im Vergleich wirklich sind.

Berücksichtigt man zudem, dass für den Drehwinkel

$$\theta \sim v_m \tau_p \quad (3.2.8a)$$

gilt, was in etwa

$$\lambda \tau_p \propto \lambda/v_m, \quad (3.2.8b)$$

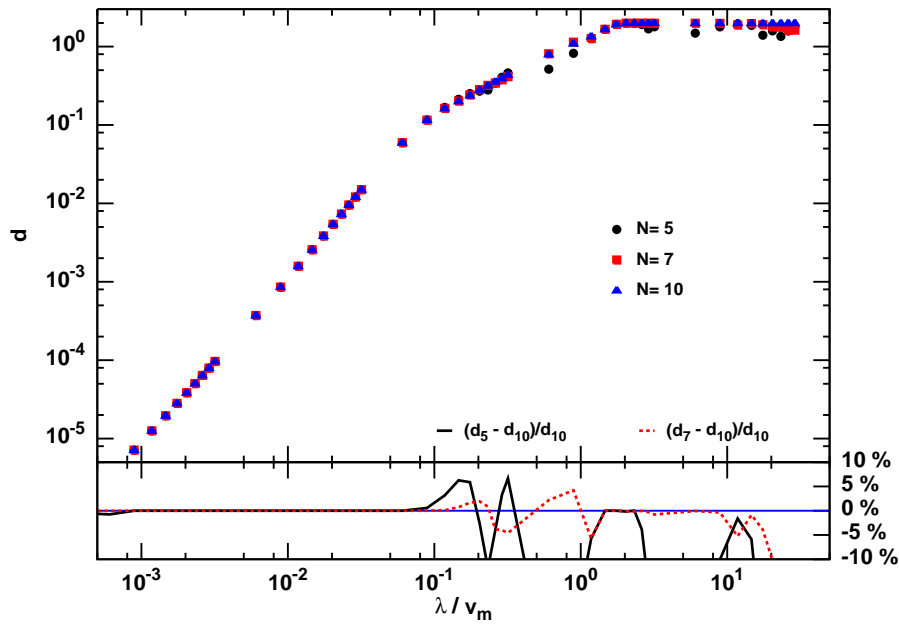
also dem Entwicklungsparameter aus Abschnitt 2.1 entspricht, so erhält man durch diese Skalierung auch noch eine bessere Vergleichsmöglichkeit der numerischen Ergebnisse mit den analytisch berechneten Näherungen. Zudem kann so auch der gewünschte experimentelle Vergleich leichter erfolgen.

Abbildung 3.4 zeigt die Ergebnisse des Vergleichs unterschiedlicher Systemgrößen untereinander. Man erkennt hier deutlich, dass im Gültigkeitsbereich der Näherungen aus 2.1 keine Abhängigkeit mit der Systemgröße erkennbar ist. Verlässt man diesen Bereich, treten Schwankungen auf, die keiner offensichtlichen Systematik folgen und daher im Folgenden nicht näher analysiert werden.

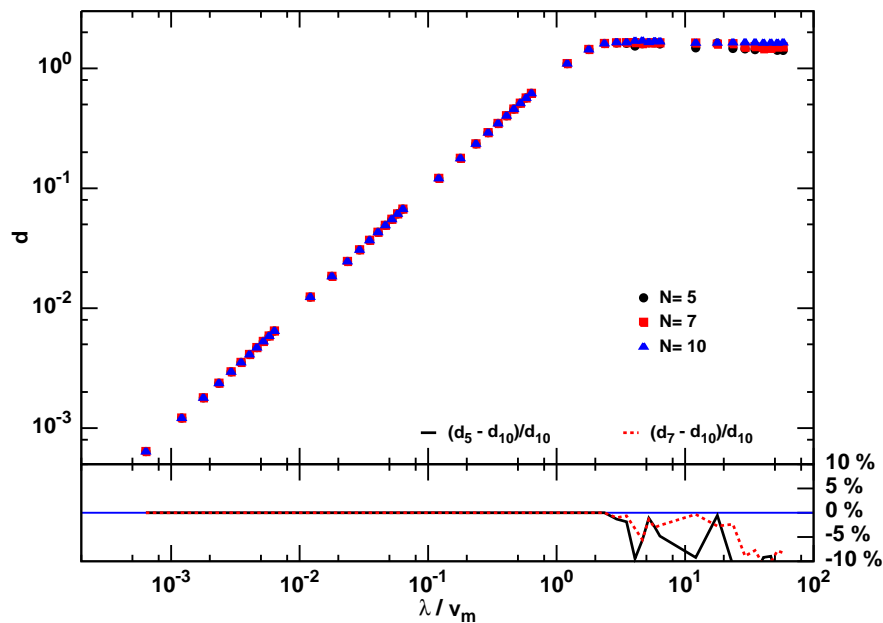
In Abbildung 3.4 erkennt man auch, dass im Bereich kleiner Kopplungen ($\lambda/v_m < 1 \times 10^{-1}$ für den Puls U1 bzw. $\lambda/v_m < 1$ für SGLPi) ein ausgeprägtes Potenzverhalten erkennbar ist, das der Potenzentwicklung gemäß Gleichungen (3.1.14a) und (3.1.14b) entspricht.

Nachdem auf diese Weise einerseits die analytische Vermutung – Unabhängigkeit der Ergebnisse dieses Modells von der Systemgröße – bestätigt wurden und andererseits sichergestellt wurde, dass das Programm diesbezüglich verlässlich arbeitet, erfolgt im nächsten Schritt der qualitative und quantitative Vergleich der einzelnen Pulse.

⁸Die also möglicherweise eine große Ähnlichkeit zum idealen δ -Puls aufweisen, jedoch experimentell unter Umständen schwer realisierbar sind.



(a) U1



(b) SGLPi

Abbildung 3.4 Vergleich unterschiedlicher Systemgrößen im Kettenmodell. Dargestellt werden zwei Pulse U1 (a) und SGLPi (b) bei gleichem Badskalenparameter $\alpha = 5$ ($\omega = \alpha\lambda$). Die Kopplungskonstanten λ werden jeweils in Einheiten der maximalen Feldamplitude v_m des jeweiligen Pulses angegeben. Im jeweils unteren Graphen ist die prozentuale Abweichung der Werte im Vergleich zu $d(N = 10)$ aufgetragen. Man erkennt, dass erst für hohe Kopplungen nennenswerte Abweichungen auftreten. Der „Knick“ in (a) bei $\lambda/v_m \approx 1 \times 10^{-1}$ ist auf Gleichung (2.1.38b) und die konkreten Werte η_{ij} zurückzuführen. Weitere Erläuterungen finden sich im Text.

3.2.2. Analyse des Kettenmodells I

In diesem Kapitel werden die in Abschnitt 2.1.4 (Seite 27) vorgestellten Pulse, die die Zielsetzung

$$U_{ip}(\tau_p, 0) = U_p(\tau_p, \tau_s) \hat{P}_\theta U_p(\tau_p, 0) \quad (2.1.9)$$

verfolgen, anhand des vorgestellten Kettenmodells (Gleichung (3.2.1)) untersucht und verglichen^a.

^aIm Folgeabschnitt 3.2.3 (Seite 71) geschieht dies für die Pulse aus Kapitel 2.2.2.

Dabei soll auch gezeigt werden, dass das Verhalten dieser Pulse den Rechnungen aus Unterkapitel 2.1.1 den abgeleiteten Formeln der Magnusentwicklung (Gleichungen (2.1.37), (2.1.38) und (2.1.39)) aber auch der daraus abgeleiteten Potenzreihenentwicklung (Unterkapitel 3.1.1) in weiten Teilen gehorcht.

Darüber hinaus wird auch die Güte der einzelnen Pulse miteinander verglichen, d.h. es gilt noch zu zeigen, dass die optimierten Pulse tatsächlich eine Verbesserung gegenüber den nicht optimierten Pulsen (SGLPi und SGLPi2) darstellen. Dies kann dann als Grundlage für weitere – unter Umständen auch experimentelle – Untersuchungen dienen.

Natürlich wird auch geprüft, in welchen Bereichen die Näherungen – also Magnusentwicklung und Potenzreihenentwicklung – Gültigkeit besitzen, und ab wann sie scheitern. Bis zu diesem Abschnitt wurde ja noch nicht geklärt, ob nicht höhere Ordnungen der Magnusentwicklung auf Grund unbekannter Einflüsse die Resultate dominieren.

Wie bereits in Kapitel 3.2.1.1 werden auch hier die Kopplungskonstanten λ mit der maximalen Feldamplitude v_m skaliert. Die Darstellungen der analytischen Näherungen in den gezeigten Abbildungen wurden dahingehend angepasst.

Betrachtet man die Abbildungen 3.5 und 3.6, fällt positiv auf, dass die Ergebnisse der Magnusentwicklung in einem erstaunlich großen Bereich Gültigkeit besitzen⁹. So besteht guter Grund zu der Annahme, dass die vorgeschlagenen optimierten Pulse in vielen experimentellen Umgebungen zur Anwendung kommen können. Die Gültigkeit der Näherung wird im folgenden genauer untersucht.

Weiterhin zeigen die Graphen 3.5 und 3.6 auch, dass die optimierten Pulse gegenüber den einfachen Pulsen (SGLPi, SGLPi2) eine deutliche Verbesserung hinsichtlich d darstellen.

Man erkennt dies daran, dass der Abstand d – welcher ja den Abstand des realen Pulses zum idealisierten Puls gemäß Gleichung misst – der einfachen Pulse in großen Bereichen deutlich über dem d der optimierten Pulse rangieren. In Teilen ist sogar eine Verbesserung des Abstandmaßes d um bis zu zwei Größenordnungen zu erkennen. Erst bei großen λ bzw. großen α nähern sich die Kurven deutlich einander an.

Diese Resultate zeigen, dass die Näherung in einem weiten Parameterbereich Gültigkeit besitzt. Die Befürchtung, dass höhere Ordnungen aufgrund großer Entwicklungsparameter schon früh wesentliche Beiträge liefern, hat sich daher nicht bewahrheitet.

⁹Anders als in unserer Publikation wurde hier direkt gegen die Magnusentwicklung und **nicht** gegen die Potenzreihenentwicklung getestet.

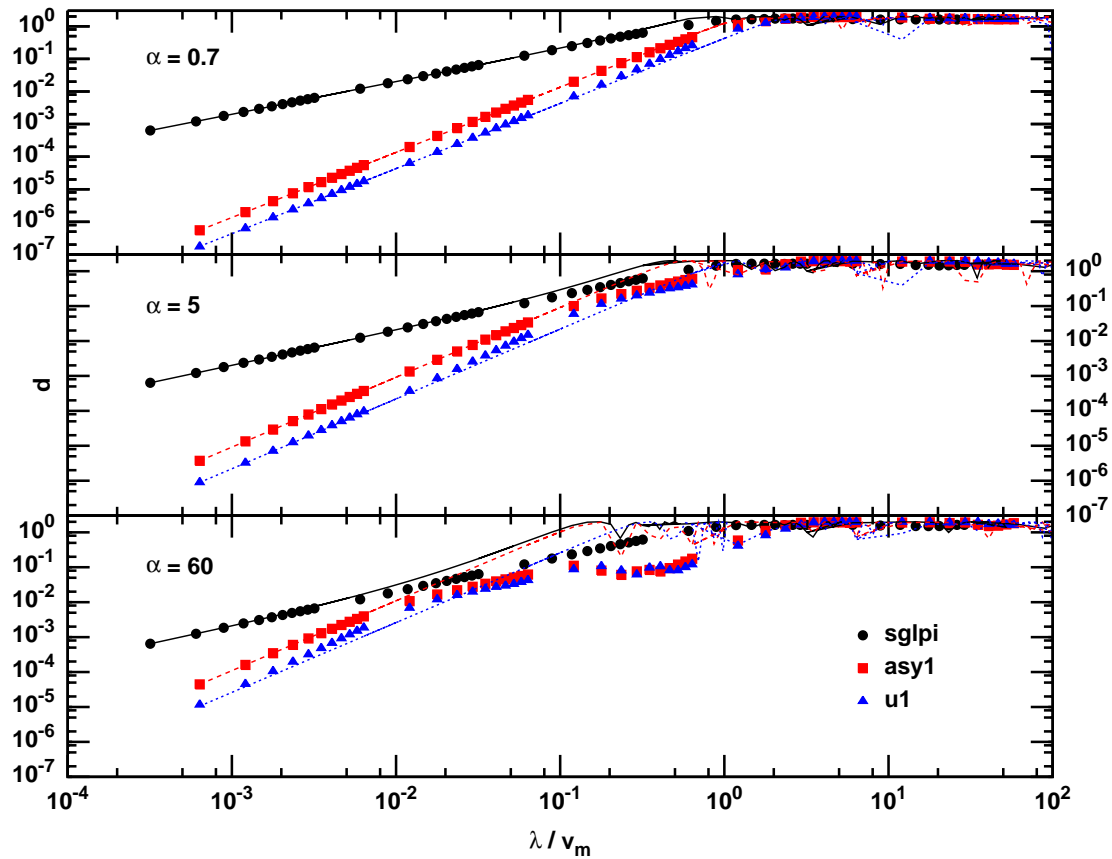


Abbildung 3.5 Das Abstandsmaß d aufgetragen gegen die Kopplungskonstante λ für unterschiedliche Badparameter α in einem System mit sechs Badspins ($N = 7$) aufgetragen. Dargestellt sind verschiedene π -Pulse gemäß Abschnitt 2.1.1. Die eingezeichneten Linien geben die jeweilige analytische Erwartung gemäß Gleichung (3.1.14a) bzw. (3.1.14b) an. Anders als in (Karbach et al. 2008) wird hier nicht mit der Potenzreihenentwicklung (3.1.14a) oder (3.1.14b) sondern mit der Magnusentwicklung (2.1.38) verglichen.

Wie in Kapitel 2.1.4 dargestellt wurde, gelang es nicht, einen $\pi/2$ -Pulse zu finden, der alle Entwicklungskoeffizienten η_{2j} der zweiten Ordnung verschwinden lässt. Der symmetrische S2NDPi2- und der asymmetrische A2NDPi2-Puls¹⁰ weisen jeweils einen nichtverschwindenden Parameter η_{23} auf (siehe auch Tabelle 2.3).

Betrachtet man den Entwicklungoperator der zweiten Ordnung $\eta^{(2)}$ aus Gleichung

$$\eta^{(2)} = i(\eta_{21}\sigma_x + \eta_{22}\sigma_z)\lambda[\mathcal{H}_b, A] + \eta_{23}\sigma_y\lambda^2 A^2, \quad (2.1.38b)$$

so stellt man fest, dass in dieser Konstellation ($\eta_{21} \approx \eta_{22} \approx 0$) nur der letzte Term der Gleichung $\eta_{23}\sigma_y\lambda^2 A^2$ Beiträge liefert. Gäbe es nur die zweite Ordnung wären diese Pulse also unabhängig von Badeinflüssen bzw. von α . Da aber höhere Ordnungen $\eta^{(3)} \propto \lambda^3$ existieren, ist davon auszugehen, dass sich im Falle kleiner Skalenparameter α das Abstandsmaß d im Gültigkeitsbereich der Potenzreihenentwicklung proportional zu λ^2 im Falle großer α sich aber proportional zu λ^3 verhält, also

$$d_{A/S2NDPi2} \propto \begin{cases} \lambda^2 & \text{kleine } \alpha \\ \lambda^3 & \text{große } \alpha \end{cases} \quad (3.2.9)$$

¹⁰Manchmal mit S2nd1 und A2nd1 bezeichnet

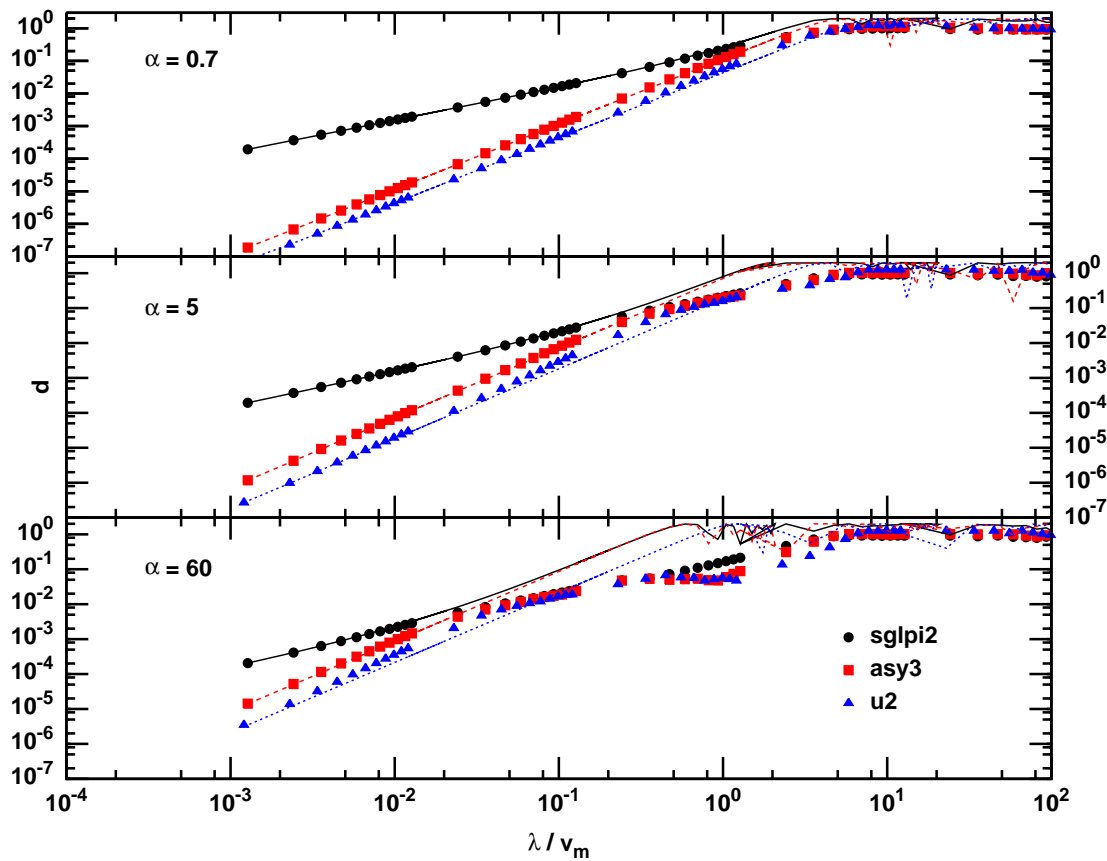


Abbildung 3.6 Das Abstandsmaß d aufgetragen gegen den Kopplungsparameter λ für unterschiedliche Badparameter α in einem System von sechs Badspins ($N = 7$). Dargestellt sind verschiedene $\pi/2$ -Pulse gemäß Abschnitt 2.1.1. Die farbigen Linien zeigen die Ergebnisse der Magnusentwicklung (2.1.38).

gilt. Dieser Effekt ist auch verantwortlich für die Abweichungen der Magnusentwicklung von den Daten der vollen Zeitpropagation (Abbildung 3.7), da unsere Magnusentwicklung nur die zweite nicht aber höhere Ordnungen berücksichtigt.

Vergleicht man zudem die Abbildungen 3.6 und 3.7 quantitativ miteinander, so übertreffen die Pulse A2NDPi2 und S2NDPi2 die Ergebnisse der anderen Pulse in großen Teilen um etwa eine Größenordnung.

Auch diese Ergebnisse zeigen deutlich den möglichen Nutzen, den diese Methode der Pulsoptimierung bietet und sollten weitere – insbesondere experimentelle – Arbeiten motivieren.

Dazu muss hier angemerkt werden, dass die relativ komplizierte Pulsstruktur von A2NDPi2 und S2NDPi2 – hinsichtlich der notwendigen schnellen Schaltvorgänge der Feldamplitude – entsprechende experimentelle Anforderungen bedingt. Der zu erwartende Gewinn kann diesen Aufwand aber dennoch rechtfertigen.

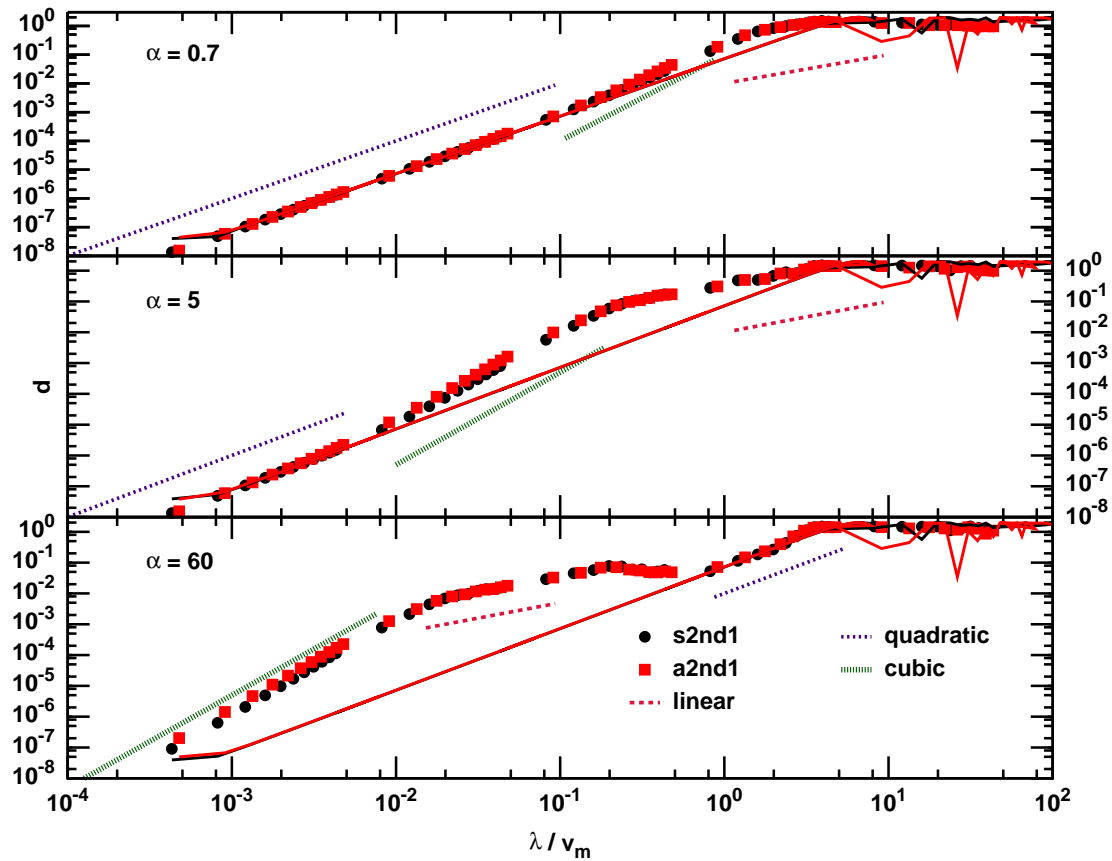


Abbildung 3.7 Das Abstandsmaß d aufgetragen gegen den Kopplungsparameter λ für unterschiedliche Badparameter α in einem System von sechs Badspins ($N = 7$). Dargestellt sind verschiedene $\pi/2$ -Pulse gemäß Abschnitt 2.1.1, die die zweite Ordnung teilweise verschwinden lassen. Neben den Ergebnissen der Magnusentwicklung der zweiten Ordnung (durchgezogene rote und schwarze Linie) wurden – zum besseren Vergleich – abschnittsweise Potenzgesetze ($\propto \lambda^3$, $\propto \lambda^2$ und $\propto \lambda$) eingezeichnet, die aber quantitativ nicht mit der Potenzreihenentwicklung aus Abschnitt 3.1.1 übereinstimmen.

3.2.2.1. Gültigkeitsbereich der Magnusentwicklung (2.1.37)

Natürlich ist es von großem Interesse, eine die Gültigkeit der Magnusentwicklung für die Pulse des Abschnitts 2.1.1 zu untersuchen. Die Abweichungen der vollen Zeitentpropagation verglichen mit der Exponentialentwicklung sollen als Maß der Verlässlichkeit der Entwicklung dienen.

Zum Vergleich werden dazu für unterschiedliche Kopplungsparameter α bei unterschiedlichen Werten für λ die Abstandsmaße d gemäß Gleichung (3.1.7) sowohl für die volle Zeitentwicklung als auch für die Näherung berechnet. Diese Werte werden im Folgenden mit d_{data} und d_{approx} gekennzeichnet.

Die Berechnung erfolgt dabei jeweils in einem vergleichsweise kleinen Spinsystem von insgesamt $N = 5$ Spins, um die erforderliche Rechenzeit überschaubar zu halten. Da – wie in Abschnitt 2.1.1 gezeigt – die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Systemgröße im Rahmen dieses Modells gering ist, ist dieses Vorgehen gerechtfertigt.

Da die Berechnung der d_{approx} zudem einfacher und schneller ist als die der d_{data} bietet es sich an, d_{approx} an mehr Stützstellen λ zu berechnen, als d_{data} . Das hat zur Folge, dass ein direkter Vergleich „Punkt für Punkt“ nicht möglich ist, da unterschiedliche Gitter vorliegen. Um den Vergleich von d_{data} und d_{approx} dennoch zu vollziehen wird daher wie folgt vorgegangen.

Beide Datensätze d_{data} und d_{approx} werden jeder für sich interpoliert. Dies geschieht mit kubischen Splines umgesetzt in Routinen der GNU Scientific Library (GSL 19). Anschließend bestimmt man den Wert λ_m , an dem die **relative Abweichung** r der Kurven voneinander, d.h..

$$r = \frac{d_{\text{data}} - d_{\text{approx}}}{d_{\text{approx}}}, \quad (3.2.10)$$

einen bestimmten Wert annimmt. Dazu wird das Brentsche Nullstellensuchverfahren der (GSL 19) genutzt. Die relative Abweichung r dient später als Eingangsvariable, mit deren Hilfe der Punkt (λ_m, d_m) bestimmt wird, ab dem d_{data} und d_{approx} zu stark voneinander abweichen.

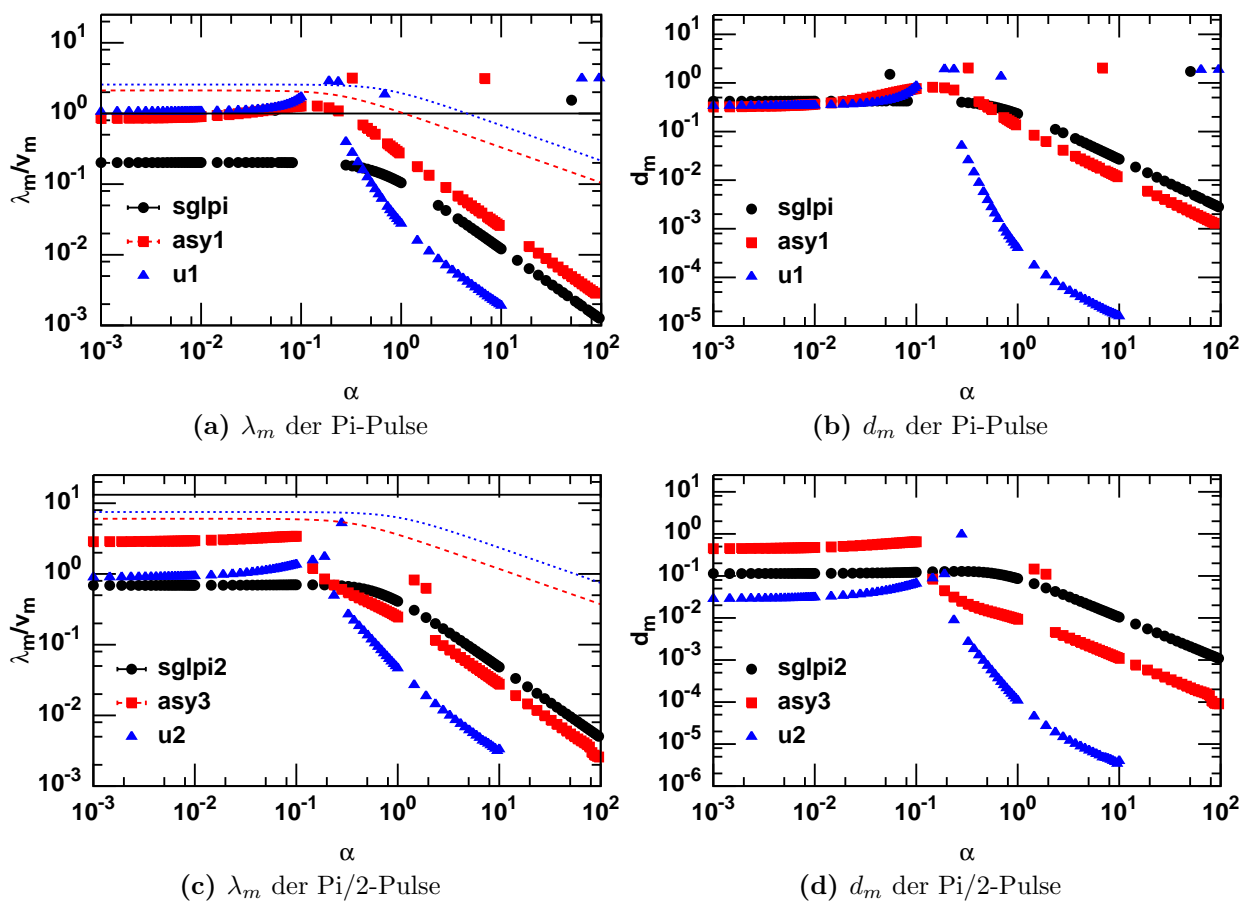


Abbildung 3.8 Dargestellt sind die Stellen λ_m bzw. d_m ab der die relative Abweichung r der Daten der vollen Propagation von denen der Potenzreihenentwicklung den Wert $r = 0.05$ überschreitet. Die in (a) und (c) eingezeichneten farbigen Linien zeigen an, ab welchem λ_m die Potenzreihenentwicklung (Gleichungen (3.1.14a) und (3.1.14b)) den Maximalwert $d_{\text{max}}(\lambda_m) = 2$ erreicht.

Die Abbildungen 3.8 zeigen die Ergebnisse dieses Vergleichs. Man erkennt gut, dass mit steigendem Badeinfluss α die Übereinstimmung zwischen Idealpuls und Magnusentwicklung nachlässt. Dabei fällt auf, dass bis zu einem gewissen α von etwa 1×10^{-1} der Wert von λ_m kaum variiert.

Erfreulicherweise liegen auch die Werte der λ_m der optimierten Pulse meist oberhalb des Werts der simplen Pulse sglpi und sglpi2 . Dies zeugt davon, dass diese Pulse hinsichtlich der zugrundeliegenden Berechnungen länger stabil sind und besser durch die Exponentialentwicklung beschrieben werden, als die nicht-optimierten Pulse (siehe Abbildungen 3.8a und (c)).

Dennoch muss festgestellt werden, dass dieses Verhalten der optimierten Pulse nicht in allen Bereichen zutrifft. Insbesondere im Bereich großer $\alpha \gtrsim 1$ treten Abweichungen auf. Die einfachen Pulse (SGLxxx) gehorchen der Magnusentwicklung scheinbar besser. Dazu betrachte man die Abbildungen 3.8b und (d).

Dies stellt keine Aussage hinsichtlich der Güte der Pulse selbst dar. Diese kann nur im Vergleich der Pulse untereinander bei gleichen Parametern λ und α bestimmt werden.

3.2.2.2. Gültigkeit der Potenzreihenentwicklung

Neben der Magnusentwicklung nach Gleichung (2.1.37) wurde in weiterer Näherung das Potenzverhalten – also die Asymptik – der Daten abgeleitet (Vergleiche Gleichungen (3.1.14a) und (3.1.14b)). Da diese ggf. leichter¹¹ und schneller zu berechnen ist, als die Exponentialentwicklung lohnt es, auch diese mit den gewonnenen Daten zu vergleichen.

Durch den analytischen Zugang zum Kettenmodell (Gleichung (3.2.1)) stehen analytische Ausdrücke der Eigenwerte der Operatoren $\eta^{(1)}$ und $\eta^{(2)}$ zur Verfügung. In Folge dessen kann das asymptotische Verhalten anhand geschlossener Formeln untersucht werden, sofern man nur die jeweils führende Ordnung in λ betrachtet.

Die Potenzentwicklung einer nichttrivialen Funktion hat immer¹² einen Bereich, ab dem höhere Ordnungen wesentliche Beiträge liefern und der Abbruch der Reihe nicht mehr zulässig ist. Speziell dieser Bereich soll nun im Folgenden adressiert werden.

Spätestens, wenn

$$d_{\max} = 2 \quad (3.2.11)$$

erreicht ist, was aus

$$d_{\text{potenz}} = \sqrt{\max(\text{EigenValue}[\Delta\Delta^\dagger])} \quad (3.1.7)$$

folgt (siehe Gleichung (3.1.11) auf Seite 53), müssen die unbeschränkte Näherung der ersten und zweiten Ordnung

$$d_{\text{linear}} = \sqrt{\max(\text{EigenValue}[\eta^{(1)}\eta^{(1)}])} \quad (3.1.14a)$$

und

$$d_{2\text{nd}} = \sqrt{\max(\text{EigenValue}[\eta^{(2)}\eta^{(2)}])} \quad (3.1.14b)$$

ihre Gültigkeit verlieren. Daher bietet es sich an, die Stellen an denen wesentliche Abweichungen zwischen d_{data} und d_{potenz} auftreten mit den maximal möglichen Stellen – also $(\lambda_{\max}, d_{\max} = 2)$ – zu vergleichen

Die Resultate (siehe Abbildungen 3.5, 3.6 und 3.7) ließen vermuten, dass für kleine α das asymptotische Verhalten ($\propto \lambda^x, x = 1, 2, 3$) erst kurz vor Erreichen des Maximalwertes $d_{\max} = 2$ seine Gültigkeit verliert.

¹¹Diese in Einzelfällen sogar analytisch berechenbar ist.

¹²Es sei denn es handelt sich um ein Polynom.

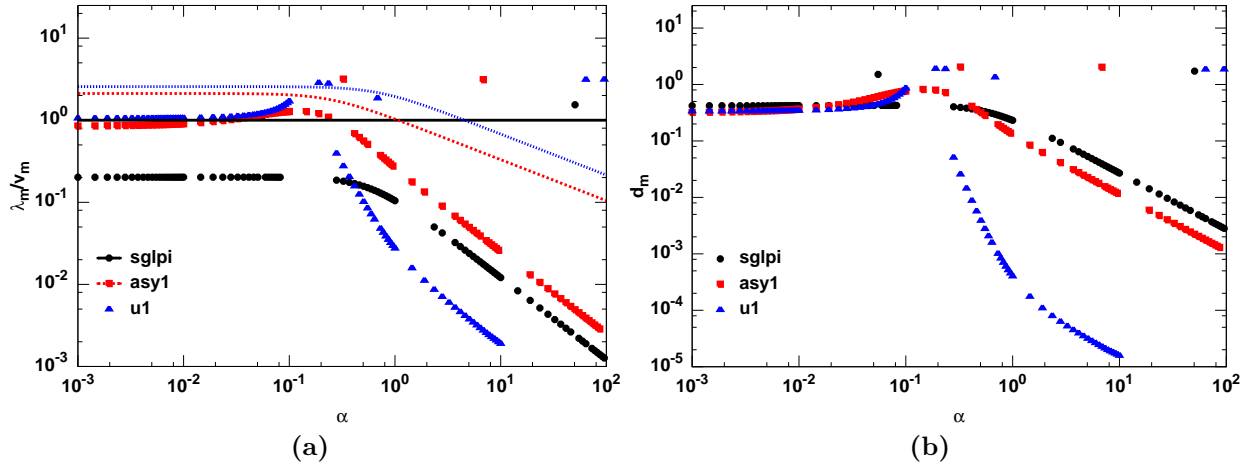


Abbildung 3.9 (a) zeigt den Vorfaktor a_α eines quadratischen Fits $d = a_\alpha \lambda^2$ aufgetragen gegen den Badparameter α . Zum besseren Vergleich wurde auch hier gemäß λ/v_m skaliert. Die farbigen Linien stellen die asymptotische Erwartung gemäß (3.2.13) dar. Der „Knick“ bei $\lambda/v_m \approx 0.5$ erklärt sich durch die Existenz des konstanten Summanden η_{23} in Gleichung (3.2.13). In (b) ist dargestellt, ab welchem Wert λ_m die Daten der vollen Zeitentwicklung um mehr als 1% von denen der Potenzreihenentwicklung (Gleichung (3.1.14b)) abweichen. Die farbigen Linien zeigen, ab welchem λ_{\max} Gleichung (3.1.14b) den Wert $d_{\max} = 2$ erreicht. Beide Graphen wurden für $N = 5$ generiert.

Da die konkrete Form der Kommutatoren (Gleichungen 3.2.3a und (3.2.3b) sowie die analytische Form der Eigenwerte (Gleichung (3.2.6)) und somit auch d_{potenz} analytisch vorliegt, kann mit Hilfe der Gleichung (3.1.14b) eine Form

$$d_{\text{potenz}} = a_\alpha \lambda^2 \quad (3.2.12)$$

angegeben werden, die den Bereich in dem die Potenzreihenentwicklung Gültigkeit besitzt quantitativ beschreibt. Die Steigung a_α ergibt sich zu

$$a_\alpha = \sqrt{16\alpha^2(\eta_{21}^2 + \eta_{22}^2) + \eta_{23}^2} . \quad (3.2.13)$$

Aber nicht nur die Steigung, sondern auch Kopplung λ_m und Abstandsmaß d_m , ab denen die Potenzreihenentwicklung und die Daten der vollen Zeitentwicklung voneinander abweichen sind interessant. Für Pulse zweiter Ordnung erhält man

$$\lambda_m = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{16\alpha^2(\eta_{21}^2 + \eta_{22}^2) + \eta_{23}^2}} . \quad (3.2.14)$$

Zuerst wird getestet, inwieweit – also in Abhängigkeit von α – die asymptotische Form der vollen Zeitentwicklung entspricht. Dazu wurden jeweils 100 α ($\alpha \in [1 \times 10^{-3} \dots 60]$) mit jeweils insgesamt 100 λ -Datenpunkten ($\lambda \in [1 \times 10^{-3} \dots 100]$) erstellt. Anschließend wurde eine Funktion $f = a_\alpha \lambda^2$ an diese Daten angepasst. Die obere Fitgrenze wurde dynamisch so gewählt, dass der Fehler des Fits unter 1×10^{-4} lag. Dieses Vorgehen führte dazu, dass für größere α die Zahl der Datenpunkte des Fits rapide abnimmt¹³, was man unter anderem an den größer werdenden Fehlerbalken erkennt.

¹³Dies ist dem festen Intervall der Datennahme geschuldet. Eine angepasste Bereichswahl der Eingangsdaten könnte diesen Effekt auffangen, dürfte aber nur geringfügige Verbesserungen erzielen.

In Abbildung 3.9a ist gezeigt, wie sich die Steigung a_α der Pulse U1 und ASY3 in Abhängigkeit von α verhält. Diese Daten (Abbildung 3.9a) weisen erst bei sehr großen $\alpha \gtrsim 20$ deutliche Abweichungen vom asymptotischen Verhalten gemäß Gleichung (3.2.14) auf.

Parallel wird geprüft, ab welchem λ_m die Simulationsdaten der vollen Zeitentwicklung um mehr als 0.01 von der Potenzreihenentwicklung zweiter Ordnung (3.1.14b) abweichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.9b gezeigt. Man erkennt gut, dass die tatsächlichen Werte nicht der Gleichung (3.2.14) entsprechen. Dennoch wird die Aussage bestätigt, dass diese Annahme zumindest den qualitativen Kurvenverlauf widerspiegelt.

Abbildung 3.9b zeigt die Stellen λ_m ab denen der oben angesprochene Fit seine Gültigkeit verliert. Hier wurde dazu eine relative Abweichungen von $r > 0.01$ vorgegeben. Es wurden auch die analytisch berechneten Stellen λ_{\max} an denen $d_{\max} = 2$ erreicht wird eingezeichnet.

Die Analyse (Abbildung 3.9b) führt dazu, dass die Annahme, dass erst ab $\lambda_m = \lambda_{\max}$ das asymptotische Verhalten seine Gültigkeit verliert, verworfen werden muss.

Insbesondere bei großen $\alpha \gtrsim 0.5$ sind die Abweichungen gut erkennbar, aber auch bei kleineren $\alpha \lesssim 0.5$ treten Abweichungen auf, die aber auf Grund doppeltlogarithmischer Auftragung nicht gleich ins Auge fallen.

Interessanterweise scheint es bis $\alpha \approx 0.1$ einen Bereich zu geben, an dem die Grenze λ_m nach oben ansteigt. Dieses Verhalten ist aber physikalisch nicht zu rechtfertigen. Wahrscheinlich sind hier numerische Effekte (wie endliche Datenbasis oder unbekannte numerische Effekte) als Ursachen anzunehmen. Eine eingehendere Betrachtung dieses Effekts, der sich auch bei den Pulsen der zweiten Zielsetzung ausbildet, findet eben dort auf Seite 74 statt.

3.2.2.3. Erreichen des Plateaus

Aufgrund der Abbildungen 3.5, 3.6 und 3.7 kam der Verdacht auf, dass die Pulse aus Abschnitt 2.1 nicht - wie Gleichung (3.1.11) und deren Vorgänger vermuten lassen - dem Maximalwert $d_{\max} = 2$, sondern einem jeweils vom Puls und eventuell von α abhängigen Wert d_{plateau} mit wachsendem λ entgegenstreben.

Zu diesem Zweck wurden die Daten (d gegen λ) als Kurvenschar von α in einem Graphen eingezeichnet. Exemplarisch ist dies in Abbildung 3.10 für die Pulse U1 und ASY3 dargestellt. Hierdurch bestätigt sich der Verdacht, dass d_{plateau} individuell von den Pulsen abhängt.

Auch wenn diese Graphen scheinbar eine große Streuung aufweisen, ist dies nur der Form der Darstellung geschuldet. Die nähere Betrachtung zeigt, dass diese starken Abweichungen nur in wenigen Fällen (hauptsächlich bei kleinen α) auftreten. Die Standardabweichung des Plateaus ist daher sehr gering.

Das Plateau selbst - d.h. der Wert d_{plateau} - wird automatisiert bestimmt, in dem der Mittelwert über alle betrachteten $\alpha \in [0.001 \dots 100]$ (insgesamt 100 Stück) und den Bereich $\lambda > 10$ gebildet wird. Den Zusammenhang zu den Daten kann man an den eingezeichneten horizontalen Linien in Abbildung 3.10 sehen.

Das Ergebnis dieser Analyse sind in Abbildung 3.11a und Tabelle 3.11b gezeigt. Dabei sticht besonders der Unterschied zwischen den π -Pulse (U1, ASY1, SGLPi) und den $\pi/2$ -Pulsen (U2, ASY3, SGLPi2, A2nd1 und S2nd1) hervor.

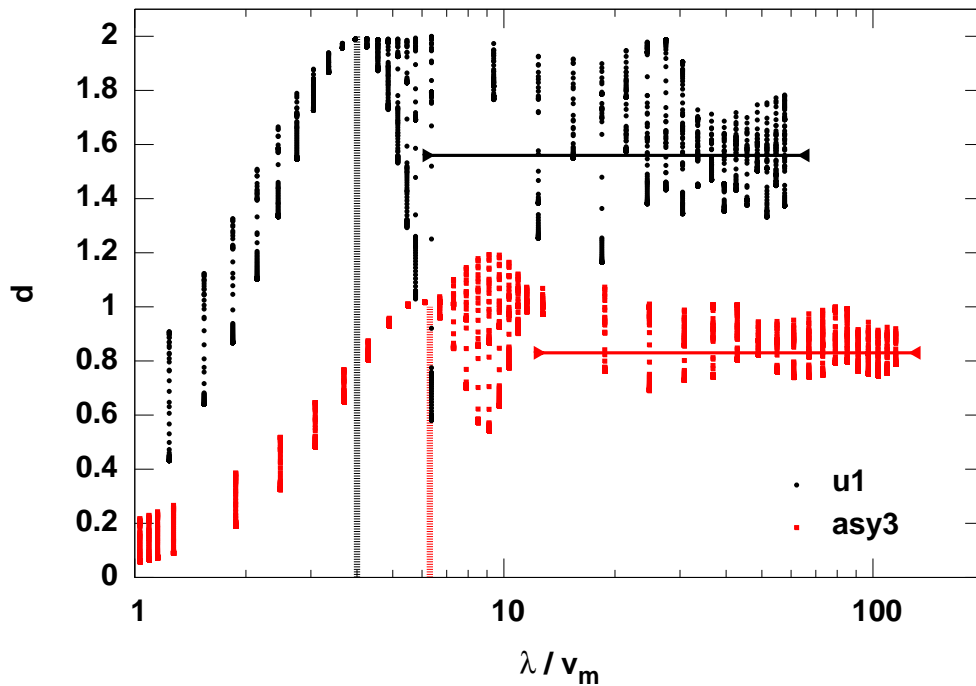


Abbildung 3.10 Überlagerung der Ergebnisse der vollen Zeitentwicklung der Pulse U1 (in schwarz) und ASY1 (in rot) für $\alpha = 0.001 \dots 100$ (in logarithmischen Schritten). Die jeweils eingezeichneten horizontalen Linien geben den über den Bereich $\lambda > 10$ gemittelten d_{Plateau} -Wert an. Die gestrichelten vertikalen Linien kennzeichnen den händisch bestimmten Wert λ_C ab dem der Kurvenverlauf nicht mehr monoton wächst.

Scheinbar weichen die $\pi/2$ -Pulse niemals so stark vom Idealpuls ab, wie die π -Pulse.

Die genaue Ursache hierfür konnte nicht geklärt werden. Es entspricht aber den Erfahrungswerten der experimentellen Kernspinresonanz¹⁴, dass π -Pulse meist schwieriger zu handhaben sind als $\pi/2$. Dieser Umstand trat hier bereits bei der Suche eines π -Pulses in dritter Ordnung (siehe Seite 28) hervor.

Neben dem Plateau selbst ist es unter Umständen auch interessant, zu sehen, ab wann die Daten der vollen Zeitentwicklung ihr monoton wachsendes Verhalten in λ verlieren und sich das Plateau auszubilden beginnt. Dieser Wert wird mit λ_{Plateau} bezeichnet

Wie man schon in Abbildung 3.10 sieht, es es schwierig – wenn nicht gar unmöglich – diese Stelle eindeutig zu identifizieren. Daher belasse ich es bei einer augenscheinlichen Bestimmung dieser Werte und hoffe dabei zumindest eine Tendenz feststellen zu können.

Die Ergebnisse dieser visuellen Messung sind in Abbildung 3.12a und Tabelle 3.12b dargestellt.

Anders als zuvor kann hier kein eindeutiger Trend abgeleitet werden.

Wenn überhaupt scheint es so, als beendeten die $\pi/2$ -Pulse erster und zweiter Ordnung (SGL-Pi2, ASY3 und U2) ihr monotonies Verhalten erst bei vergleichsweise hohen λ_{Plateau} . Aufgrund

¹⁴Gespräche mit Mitarbeitern des Lehrstuhls Experimentelle Physik III der TU Dortmund.

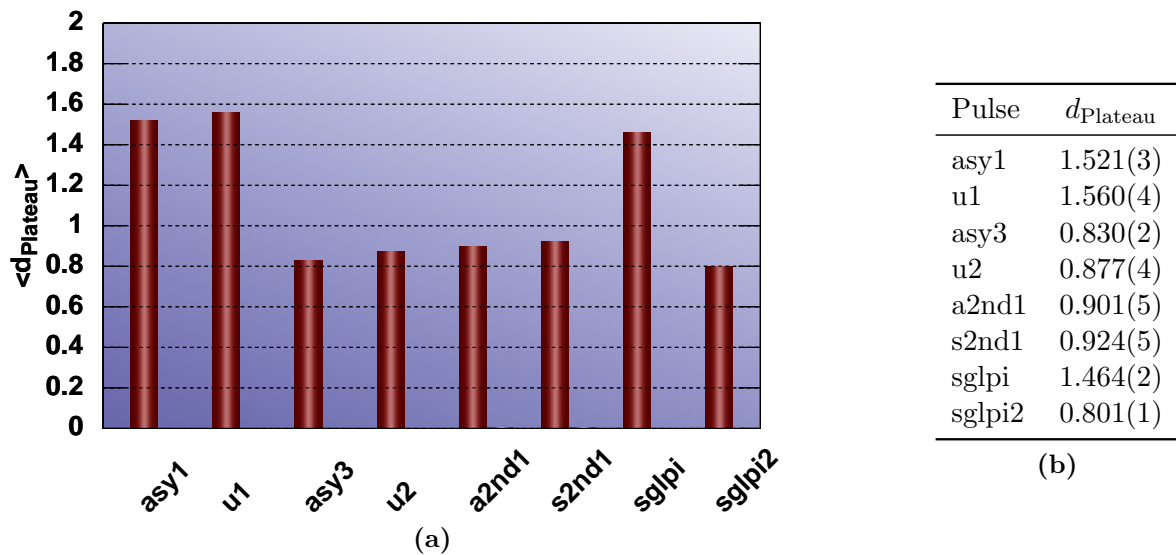


Abbildung 3.11 Grafische Darstellung (a) und die dazugehörigen Zahlenwerte (b) von d_{Plateau} . Diesen wurden über $\alpha \in [0.001 \dots 100]$ und den Bereich $\lambda > 10$ aus Daten – wie in Abbildung 3.10 gezeigt – gemittelt. Die Fehlerangaben in (b) entsprechen der Standardabweichung dieser Mittelung.

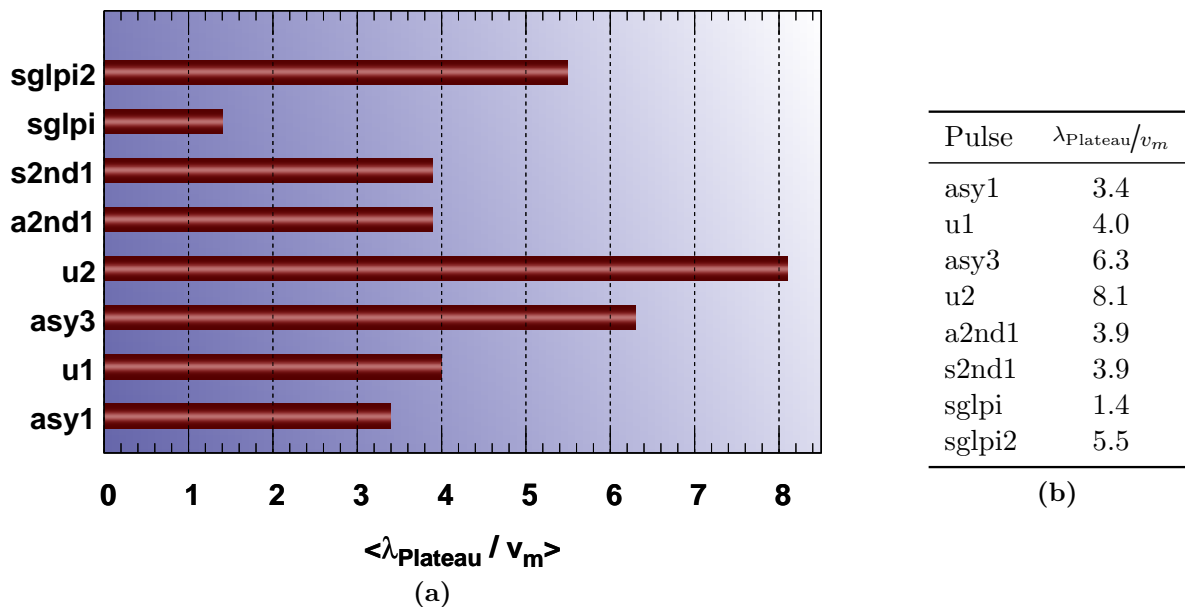


Abbildung 3.12 Grafische Darstellung (a) und die dazugehörigen Zahlenwerte (b) von λ_{Plateau} . Diesen wurden augenscheinlich über $\alpha \in [0.001 \dots 100]$ aus Daten – wie in Abbildung 3.10 gezeigt – bestimmt. Aufgrund der ungenauen Bestimmung handelt es sich hierbei nur um Indizienwerte, die allenfalls zur qualitativen Auswertung herangezogen werden dürfen.

der schwierigen Datennahme kann hier nur definitiv festgehalten werden, dass alle Pulse in etwa dem gleichen λ/v_m -Intervall von etwa 1 bis 8 erste Anzeichen von „Sättigung“, d.h. einen Zusammenbruch des monotonen Wachstums hin zu einem Plateau aufzeigen.

3.2.3. Analyse des Kettenmodells II

In diesem Abschnitt sollen die optimierten Pulse, die mit Hilfe des Formalismus aus Abschnitt 2.2.2 generiert wurden, an Hand des oben vorgestellten Kettenmodells (Gleichung (3.2.1)) getestet werden.

Dass die besprochenen Ergebnisse kaum mit der Systemgröße korreliert sind, wurde bereits in Abschnitt 3.2.1.1 gezeigt. Die Zielsetzung

$$U_{ip}(\tau_p, 0) = e^{-i\tau_p \mathcal{H}_b} \hat{P}_\theta . \quad (2.2.1)$$

der neuen Pulse hat keinen Einfluss auf die Abhängigkeit der Ergebnisse hinsichtlich der Systemgröße N . Daher beschränke ich mich hier auf die Darstellung einiger ausgewählter Ergebnisse.

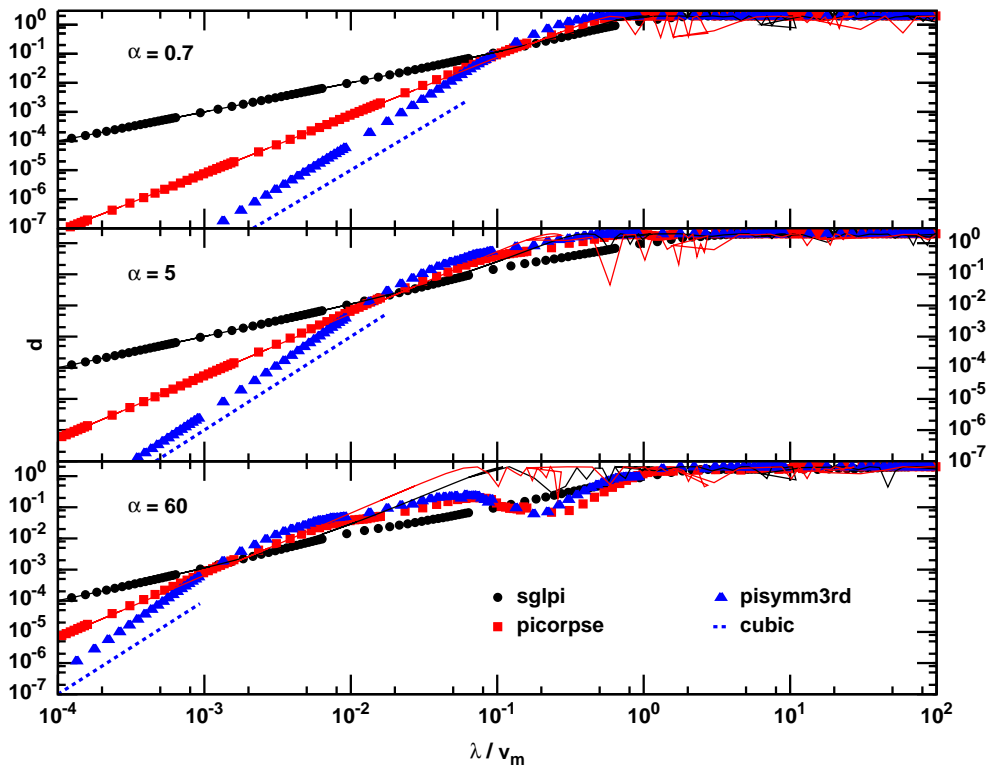


Abbildung 3.13 Das Abstandsmaß d gegen die Kopplungskonstante λ normiert auf die jeweils maximale Feldamplitude v_m für unterschiedliche Badparameter α in einem System mit sechs Badspins ($N = 7$) aufgetragen. Dargestellt sind verschiedene π -Pulse gemäß Abschnitt 2.2.1. Die farbigen Linien geben die jeweiligen Ergebnisse der Magnusentwicklung an, die Ausnahme bildet der Puls PiSymm3rd, dessen Verhalten nicht analytisch vorliegt. Daher wurde hier qualitativ eine Kurve $\propto \lambda^3$ eingezeichnet.

Wie zuvor – für die alten Pulse – vorgestellt (Abschnitt 3.2.2), zeigen die Simulationsdaten (siehe Abbildungen 3.13 und 3.14) in einem weiten λ -Bereich sehr gute Übereinstimmung mit der Magnusentwicklung (2.2.33) bzw. deren abgeleiteten asymptotischen Entwicklungen (Gleichungen (3.1.14a) und (3.1.14b)).

Anders als in Abschnitt (2.1) gelang es hier, Pulse zu generieren (z.B. PiSymm3rd und Pi2Symm2ND-C), die die zweite Ordnung ($\eta^{(2)}$) verschwinden lassen. Da uns keine analytische Formel zur Berechnung der dritten Ordnung ($\eta^{(3)}$) geschweige denn ihrer Koeffizienten η_{3j} vorliegt, werden diese Pulse lediglich qualitativ mit einem Potenzgesetz $\propto \lambda^3$ verglichen.

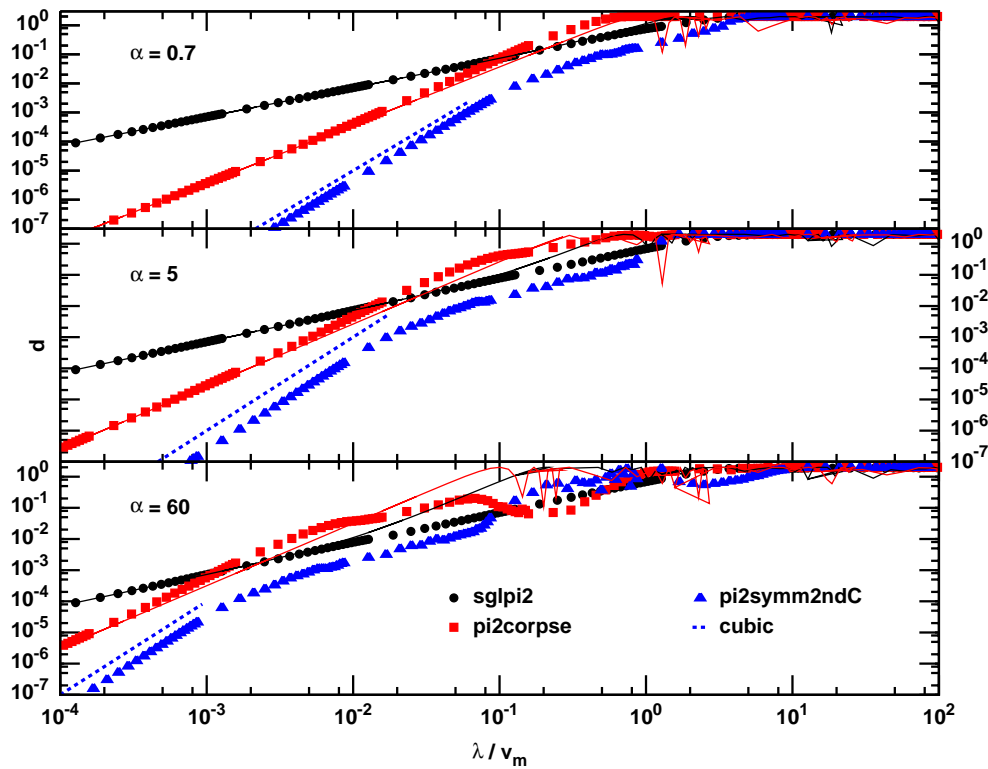


Abbildung 3.14 Das Abstandsmaß d gegen die Kopplungskonstante λ normiert auf die jeweils maximale Feldamplitude v_m für unterschiedliche Badparameter α in einem System mit sechs Badspins ($N = 7$) aufgetragen. Dargestellt sind verschiedene $\pi/2$ -Pulse gemäß Abschnitt 2.2.1. Die farbigen Linien geben die jeweiligen Ergebnisse der Magnusentwicklung an. Die Ausnahme bildet der Puls PISymm2ndC, dessen Verhalten $\propto \lambda^3$ nicht analytisch vorliegt. Hier wurde qualitativ eine Kurve $\propto \lambda^3$ eingezeichnet.

Weiterhin bestätigt sich auch unter der neuen Zielsetzung, dass die optimierten Pulse die nicht optimierten Pulse (SGLPi und SGLPi2) im Gültigkeitsbereich der Näherung um mehrere Größenordnungen übertreffen. Dies tritt um so deutlicher hervor, je kleiner der Badparameter α ist¹⁵

Der Vergleich zu den vorangegangenen Resultaten (Abbildungen 3.5, 3.6 und 3.7) zeigt sich allerdings, dass die Abweichungen der vollen Zeitentwicklung von der Magnusentwicklung bereits für kleinere λ/v_m signifikant sind.

Da die neue Zielsetzung – die Entkopplung des Bades vom Qubit (s. Gleichung (2.2.1)) – physikalisch anspruchsvoller ist, als die vorherige Zielsetzung, also die Entkopplung der Zeitentwicklung des Systems und der des applizierten Pulses (siehe Gleichung (2.1.9)), ist diese Erkenntnis aber nicht vollkommen unerwartet.

Ein weiterer Unterschied zu den vorangegangenen Resultaten sind die deutlichen Überschneidungen der Daten aus Abbildungen 3.13 und 3.14. Dies ist zwei Punkten geschuldet, nämlich

- dem höheren Optimierungsgrad ($\propto \lambda^3$) und
- den größeren Pulsamplituden (siehe Abbildung 2.10).

Ersteres führt dazu, dass – bei Koeffizienten vergleichbarer Größenordnung – eine Überschneidung früher eintritt. Zweiteres führt zu einer ausgeprägteren Verschiebung der Daten der optimierten Pulse.

¹⁵Man betrachte dazu den Abstand der schwarzen und blauen Kurven in Abbildung 3.13 und 3.14 bei $\alpha = 0.7$.

Auch hier bleibt erfreulicherweise festzuhalten, dass die optimierten Pulse, den Rechnungen der Magnusentwicklung in hohem Maße gehorchen und darüber hinaus die optimierten Pulse in einem großen Bereich eine deutliche Verbesserung gegenüber den simplen Pulsen SGLPi und SGLPi2 darstellen.

3.2.3.1. Gültigkeitsbereich der Magnusentwicklung

Wie auch zuvor soll auch der Gültigkeitsbereich der approximativen Zeitentwicklung gemäß Gleichung (2.2.33) und den in Abschnitt 2.2.1 getroffenen Annahmen untersucht werden.

Die Analyse erfolgt dabei analog der im Abschnitt 3.2.2.1 durchgeführten Betrachtungen. In einem Detail unterscheiden sie sich aber dennoch. Aufgrund der hohen Güte der Pulse und – damit verbunden – den sehr kleinen d Werten¹⁶ war es erforderlich, den angewandten Algorithmus der Matrixexponentierung anzupassen.

Statt der in Anhang B.1.1 vorgestellten Methode mit Hilfe der Eigenwerte und Eigenvektoren wurden hier – erfolgreich – so genannte Padé-Approximationen – wie in (Moler & van Loan 2003) vorgestellt – angewandt. Das Verfahren beruht auf der Zerlegung

$$\mathbf{e}^A \approx R_{pq}(A) := [D_{pq}(A)]^{-1} N_{pq}(A) \quad (3.2.15)$$

mit

$$N_{pq}(A) = \sum_{j=0}^p \frac{(p+q-j)!p!}{(p+q)!j!(p-j)!} A^j \quad (3.2.16a)$$

$$D_{pq}(A) = \sum_{j=0}^q \frac{(p+q-j)!q!}{(p+q)!j!(q-j)!} (-A)^j \quad (3.2.16b)$$

für eine Matrix A , deren Norm $\|A\|$ nicht zu groß ist (siehe Moler & van Loan 2003). Die Parameter p und q werden an Hand der Matriceigenschaften aus einer vorbereiteten Tabelle, die auf einer Optimierung dieser Werte beruht, gewählt. Durch geeignete Skalierungen wird das Verfahren zusätzlich stabilisiert¹⁷.

Die konkrete Umsetzung geschah mit Routinen aus (Tsai 2007). Diese Routinen erwiesen sich im Wertebereich nahe Null als sehr stabil. Da aber lediglich in diesem Grenzbereich eine höhere Genauigkeit erforderlich ist, wurde darauf verzichtet, auch alle anderen Programme mit Hilfe dieser Routinen umzusetzen.

Mit diesem Rüstzeug ist es nun möglich, die Daten der vollen Zeitentwicklung mit denen der Magnusentwicklung zu vergleichen. Die Abbildungen 3.15 (a) bis (d) zeigen die Ergebnisse dieses Vergleichs.

Der Übersichtlichkeit halber werden nicht alle Pulse, die ab Seite 43 vorgestellt werden, präsentiert. Ich beschränke mich auf die simplen Pulse SGLPi und SGLPi2 und die teilweise optimierten Pulse PiCorpse und Pi2Corpse. Pulse, die auch die zweite Ordnung optimieren, entziehen sich – wie oben – dieser quantitativen Analyse.

Wieder wird untersucht, ab welchem Wert λ_m die Übereinstimmung der Daten der vollen Zeitentwicklung um mehr als 5% von denen der Magnusentwicklung abweichen. Dies geschieht an

¹⁶Wir sprechen hier zeitweise von Werten im Bereich von 1×10^{-9} .

¹⁷Siehe (Moler & van Loan 2003) und (Tsai 2007)

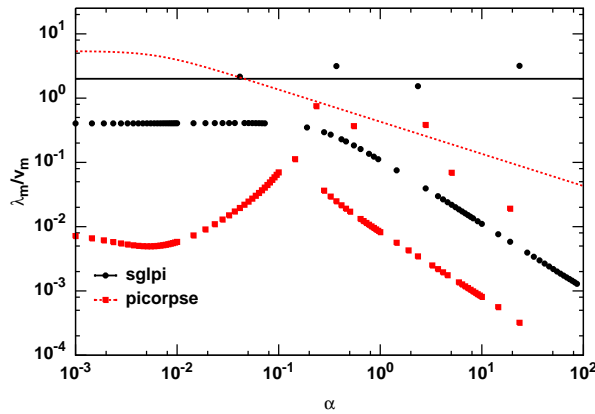
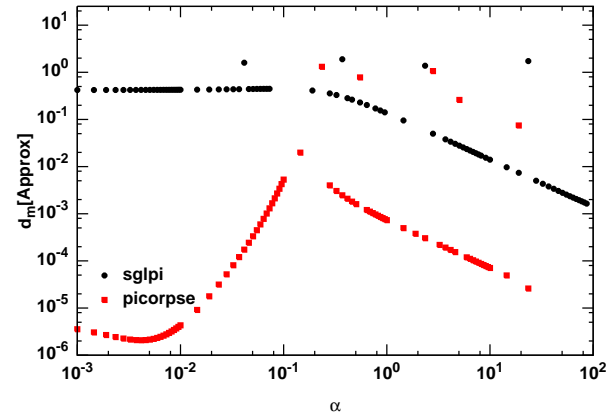
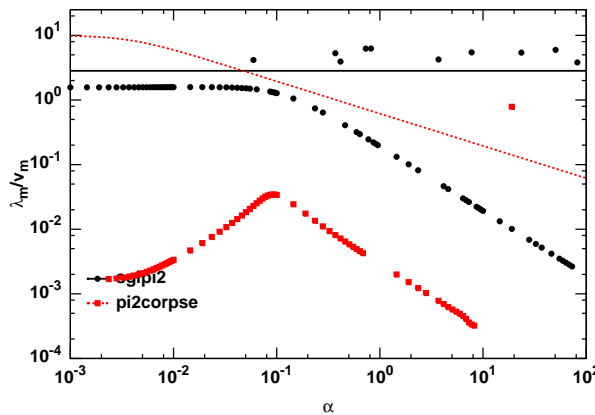
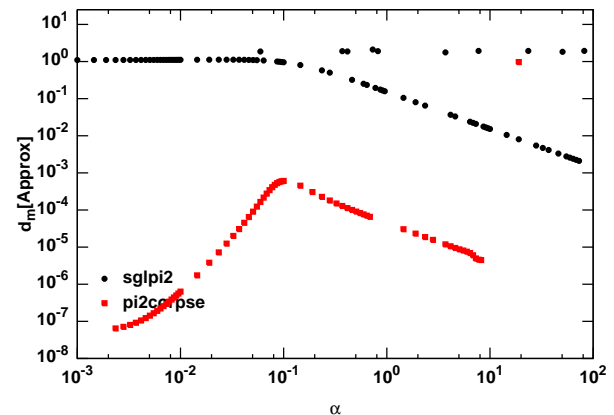
(a) λ_m der Pi-Pulse(b) $d_m(\text{Approx})$ der Pi-Pulse(c) λ_m der Pi/2-Pulse(d) $d_m(\text{Approx})$ der Pi/2-Pulse

Abbildung 3.15 Dargestellt sind die Stellen λ_m bzw. $d_m[\text{Approx}]$ an dem die relative Abweichung der jeweiligen Abstandsmaße d den Wert $r = 0.05$ annimmt. Die in (a) und (c) abgebildeten Linien zeigen an, ab welchem λ_m die asymptotische Entwicklung der Näherung den Maximalwert $d = 2$ erreicht.

einem System der Größe $N = 5$. Auch dieses Mal wird mit den Formeln, die aus der Umstellung von

$$d_{\max}(\lambda_m) = 2 \quad (3.2.17)$$

gewonnen wurden (siehe Gleichung (3.2.14)), verglichen. Die Daten sind in Abbildung 3.15 aufgetragen.

Wieder zeigen die Pulse SGLPi und SGLPi2, das bereits aus Abschnitt 3.2.2.1 bekannte und erwartete, Verhalten eines monotonen sinkenden Verlaufs mit steigendem Badparameter α .

Als interessanter erweist sich hingegen das Verhalten der Pulse PiCorpse und Pi2Corpse. Im Bereich kleiner Kopplungsparameter $\alpha \approx 0.1$ stimmen volle Zeitentwicklung und Magnusentwicklung überraschenderweise länger als zuvor überein. Erwartet wurde, dass mit steigendem α die Größe λ_m monoton sinkt oder höchstens konstant bleibt. Erst nach Erreichen eines Maximalwerts fällt λ_m mit wachsendem α .

Die Ursache für dieses unerwartete Verhalten konnte nicht mit absoluter Sicherheit ermittelt werden.

Zur Klärung wurden verschiedene Tests an den Daten durchgeführt.

- Um numerische Effekte aufzuspüren, wurden die Daten vor dem eigentlichen Vergleich logarithmiert. Aber auch hier zeigte sich das angesprochene Verhalten.
- Zudem wurden die Initialwerte (r , Datenpunktabstand, Empfindlichkeit der Nullstellensuche, etc.) variiert und geprüft. Auch hier wurde das Verhalten für λ_m bei $\alpha \approx 0.1$ bestätigt.

Letztendlich sehe ich zwei bis drei mögliche Quellen dieses Verhaltens.

Zum einen können numerische bzw. algorithmische Gründe, die Ursache dieses Effekts darstellen. Da man sich hier in einem sehr kleinen Wertebereich bewegt ($\approx 1 \times 10^{-9}$), ist nicht auszuschließen, dass numerische Ungenauigkeiten – insbesondere bei Bestimmung der relativen Abweichung r – hier eine gewichtigere Rolle spielen¹⁸.

Dieser Vermutung widerspricht allerdings, dass man dieses Verhalten schon in den ursprünglichen Daten (wie in den Abbildungen 3.15a und 3.15c exemplarisch gezeigt) mit bloßem Auge wiederfindet. Nichtsdestotrotz kann und darf ein numerischer Effekt nicht völlig ausgeschlossen werden.

Ein echter physikalischer Effekt wäre eine weitere Erklärung, erscheint aber eher unwahrscheinlich. Der steigende Badeinfluss sollte immer zu einer größeren Abweichung der Daten führen.

Am sinnvollsten scheint es daher, den Effekt mit – unbekanntem – höheren Termen der Magnusentwicklungen bzw. der vollen Zeitentwicklung zu begründen, die sich im fraglichen Bereich gerade so wegheben, dass zeitweise eine höhere Übereinstimmung zu den Werten der Exponentialentwicklung besteht.

3.2.3.2. Gültigkeit der Potenzreihenentwicklung

Wie auch zuvor soll kurz betrachtet werden, in welchem Rahmen die asymptotische Betrachtung (Gleichungen (3.1.14a) und (3.1.14b)) Gültigkeit besitzt. Dazu wurden exemplarisch zwei Pulse (PiCorpse und Pi2Corpse) für unterschiedliche Badparameter α (insgesamt 150 Stück im Bereich 1×10^{-3} bis 1×10^3 ; pro α wurden jeweils 100 λ -Werte, $\lambda \in [1 \times 10^{-4} \dots 1 \times 10^4]$) für ein System mit fünf Spins ($N = 5$) ausgewertet.

Abbildung 3.16a zeigt die Steigung a_α eines quadratischen Fits

$$d_{\text{Fit}}(\lambda) = a_\alpha \lambda^2, \quad (3.2.18)$$

der für jeden α -Wert durchgeführt wurde.

Die Datenpunkte stimmen hervorragend mit der asymptotischen Erwartung überein und weichen erst für große α sichtbar von der Kurve der Potenzreihenentwicklung (3.2.13) ab.

Die zweite Abbildung 3.16b zeigt den maximalen λ -Wert, ab dem die Daten der vollen Zeitentwicklung um mehr als 1×10^{-2} von denen der Potenzreihenentwicklung (Gleichung (3.1.14b)) abweichen.

¹⁸Man erinnere sich, dass r über eine Spline-Interpolation der Datensätze berechnet wird.

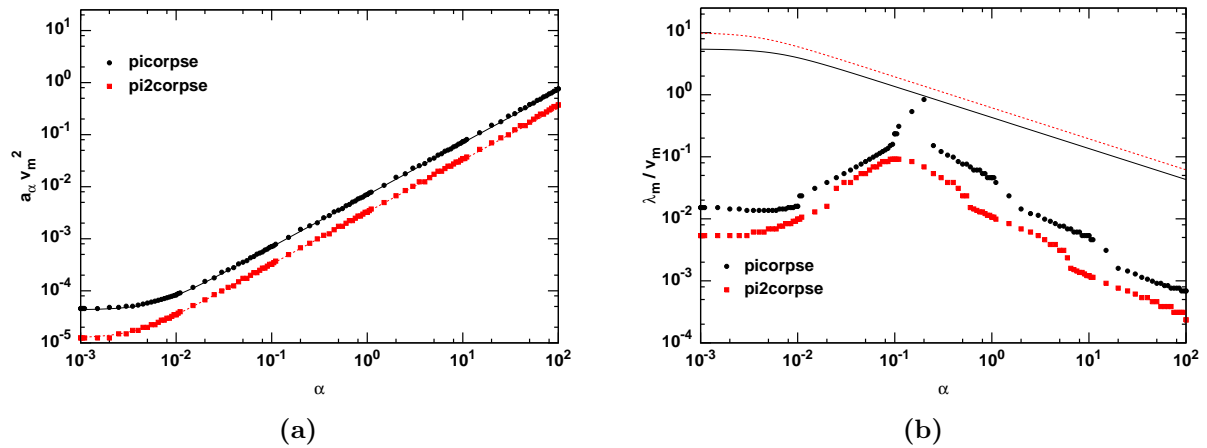


Abbildung 3.16 Beide Graphen wurden für $N = 5$ generiert. (a) Ergebnisse eines quadratischen Fits $d_{\text{Fit}} = a_\alpha \lambda^2$ aufgetragen gegen den Badparameter α . Zum besseren Vergleich wurde auch hier gemäß λ/v_m skaliert. Die farbigen Linien stellen die Potenzreihenentwicklung gemäß Gleichung (3.1.14b) dar. In (b) wurde aufgetragen, ab welchem Wert λ_m die Abweichung des d -Werts der vollen Zeitentwicklung von dem der Potenzreihenentwicklung größer als 1% ist. Die farbigen Linien zeigen, ab welchem λ Gleichung (3.1.14b) den Maximalwert $d_{\text{max}} = 2$ erreicht.

In dieser Abbildung wurde ebenfalls der maximal mögliche λ -Wert eingetragen (s. Gleichung (3.2.14)), der sich aus

$$d_{\text{max}}(\lambda_{\text{max}}) = 2 \quad (3.2.19)$$

ergibt¹⁹.

Im Vergleich zu den Daten der alten Pulse (Abbildung 3.9b) stellt man hier (Abbildung 3.16b) fest, dass die Daten der neuen Zielsetzung schon bei kleineren λ deutlich von der Potenzreihenentwicklung abweichen.

Dieses Verhalten dürfte der vergleichsweise anspruchsvolleren Zielsetzung der neuen Pulse geschuldet sein.

3.2.4. Fazit zum Kettenmodell

Sowohl alte als auch neue Pulse zeigen jeweils eine erstaunlich gute Übereinstimmung der Daten der vollen Zeitentwicklung mit denen der Magnusentwicklung. Auch die Übereinstimmung mit den daraus abgeleiteten Potenzreihen ist in großen Teilen besser als zuerst angenommen.

Des Weiteren wurde auch gezeigt, dass die optimierten Pulse der zweiten und (teilweise) dritten Ordnung eine deutliche Verbesserung gegenüber den nicht-optimierten Pulsen SGLPi und SGLPi2 aufweisen, bzw. für welche Parameterbereiche dies nicht mehr gilt.

Aufgrund dieser – sehr positiven – Resultate ist zu hoffen, dass möglichst bald intensivere experimentelle Arbeiten mit diesen Pulsen vorgenommen werden. Dies kann und soll einerseits dem Test der oben getroffenen Aussagen dienen und andererseits die Leistungsfähigkeit der optimierten Pulse hinsichtlich ihrer Zielsetzung demonstrieren.

¹⁹Dies stellt – wie bereits in Abschnitt 3.2.2.2 dargestellt – die maximal mögliche Obergrenze dar, ab der die Potenzreihenentwicklung versagen muss.

3.2.5. Überblick zum dipolaren Modell

Wie zuvor angesprochen, handelt es sich bei den Untersuchungen der Pulse an dem besprochenen Kettenmodell um einen ersten einfachen Test. Um diese Analysen fortzuführen bedarf es eines anspruchsvolleren Modells, das sich vom Kettenmodell sowohl hinsichtlich seiner Komplexität als auch in Bezug auf seine physikalischen Aussagen unterscheidet.

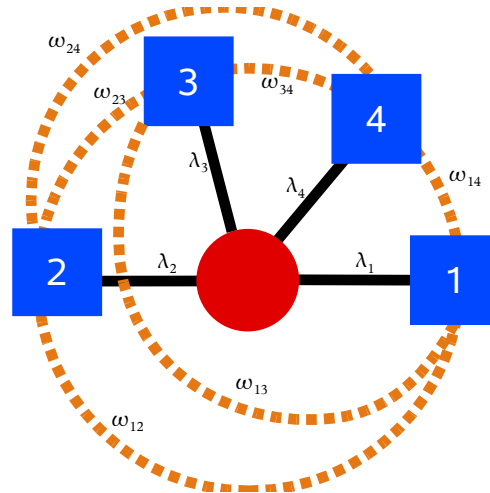


Abbildung 3.17 Skizze der Kopplungsgeometrie des dipolaren Modells für insgesamt vier Spins. Das Qubit (roter Kreis) koppelt über die z -Komponente an die Badspins (schwarze Linien, λ_i). Die Badspins (blaue Quadrate) wechselwirken über dipolare Terme (orangene Linien, ω_{ij}) miteinander..

Zum einen wurde daher eine anspruchsvollere Kopplungsgeometrie, wie sie in Abbildung 3.17 gezeigt ist, gewählt.

Hier steht das Qubit (roter Kreis) in Wechselwirkung mit **allen** Badspins. Auch die interne Kopplung des Bades wurde komplexer angelegt. Hier sind auch alle Badspins (blaue Quadrate) untereinander gekoppelt.

Die (meist) positiven Kopplungskonstanten²⁰ λ_i und ω_{ij} unterscheiden sich dabei im Regelfall²¹ für jede Kombination (i, j) .

Die Wechselwirkung des Bades orientiert sich an der Gestalt einer dipolaren Kopplung.

Diese tritt sowohl in Festkörpern als auch in Flüssigkeiten²² auf und hat ihren Ursprung in der Wechselwirkung zweier magnetischer Dipole (s. Levitt 2005, Kapitel 7.9). Auch hier unterscheidet man unter anderem zwischen heteronuklearer und homonuklearer Wechselwirkung.

²⁰Durch die später zufällig erfolgende Erzeugung der Kopplungsparameter mag es geschehen, dass einzelne λ_i oder ω_{ij} negative Werte annehmen. Die vorgegebenen Mittelwerte der Verteilungen sind aber immer positive reelle Zahlen.

²¹Zu Testzwecken werden auch die Fälle $\lambda_i = \lambda \forall i$ und/oder $\omega_{ij} = \omega \forall i, j$ betrachtet.

²²In Flüssigkeiten trägt sie aber meist nur im anisotropen Fall bei. Im isotropen gilt meist $\mathcal{H}^{\text{DD}} \approx 0$.

Der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sigma_z \cdot \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_z^{(i)}}_A + \underbrace{\sum_{i<j}^n \omega_{ij} \left(3\sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} - \vec{\sigma}^{(i)} \vec{\sigma}^{(j)} \right)}_{\mathcal{H}_b} \quad (3.2.20)$$

beschreibt ein System, in dem alle Badspins über die z -Komponente an das Qubit gekoppelt sind.

Da in diesem Modell alle Spins miteinander wechselwirken, erwartet man, dass die Simulationsergebnisse – anders als im Fall des Kettenmodells (3.2.1) – von der Systemgröße abhängen.

Es wird daher im Folgenden auch untersucht, ob diese Abhängigkeit – sollte sie denn auftreten – durch Skalierung der Kopplungskonstanten λ_i und ω_{ij} aufgefangen werden kann, so dass auch die Simulation vergleichsweise kleiner Systeme Aussagen unabhängig von der Systemgröße liefert.

Ein weiterer Unterschied zum Kettenmodell (Gleichung (3.2.1)) besteht darin, dass sich die Kopplungskonstanten λ_i und ω_{ij} der einzelnen Spins voneinander unterscheiden. Anfänglich werden aber auch Varianten betrachtet, in denen $\lambda_i = \lambda \forall i$ und/oder $\omega_{ij} = \omega$ gilt.

Der Fall $\lambda_i = \lambda$ ist aber nicht allzu interessant, da hier der Kopplungsoperator A den Gesamtspin des Bades in z -Richtung repräsentiert, der wiederum mit \mathcal{H}_b vertauscht, d.h.

$$[A, \mathcal{H}_b] = 0 \quad , \text{ falls } \lambda_i = \lambda \quad \forall i \quad (3.2.21)$$

gilt.

Die spezielle Wahl der Kopplungskonstanten λ_i und ω_{ij} wird später gemäß einer gewählten Verteilungsfunktion erfolgen. Um dabei die Rechenzeit zu minimieren werden auch Varianten genutzt, die in hinreichend guter Näherung die Ergebnisse zufällig gewürfelter Ergebnisse auch deterministisch reproduzieren.

Obwohl die Messung dipolarer Kopplungskonstanten schon Bestandteil grundlegender Lehrbücher ist (siehe z.B. Slichter 1992), wurde keine Publikationen gefunden, die experimentelle Werte zu Verteilungsfunktionen von Systemen gemäß (3.2.20) liefern. Es existieren aber theoretische Berechnungen der Verteilungsfunktionen eines dipolaren Modells siehe (Lacelle & Tremblay 1995) und (Wesenberg & Mølmer 2004). Diese liefern aber unterschiedliche Aussagen zu Verteilungsfunktion, deren Mittelwert und ihrer Varianz.

Die zitierten Arbeiten gleichen sich aber dahingehend, dass die Verteilungsfunktionen um ihren jeweiligen Mittelwert logarithmisch abfallen und daher Probleme bezüglich höherer Momente aufweisen. Dieser Umstand erschwert aber die numerische Simulation bzw. die notwendige Mittelwertbildung im Anschluss. Hier werden daher vorerst nur gleichverteilte und normalverteilte Kopplungskonstanten untersucht. Die „anspruchsvolleren“ Verteilungsfunktionen wie Cauchy-Lorentz wurden bereits implementiert, aber noch nicht eingehender analysiert. Dies kann ggf. in Folgestudien betrachtet werden.

Da die Potenzreihenentwicklung (Gleichungen (3.1.14a) und 3.1.14b) in den vorangegangenen Kapiteln bereits sehr gute Resultate lieferte, wird in den folgenden Abschnitten – sofern nicht anders vermerkt – mit der Potenzreihenentwicklung statt der Magnusentwicklung gearbeitet.

3.2.6. Analyse des Dipolaren Modells I

3.2.6.1. Konstante Kopplungen

In diesem Abschnitt wird der Fall $\lambda_i = \lambda$ und $\omega_{ij} = \omega$ untersucht. Der Hamiltonoperator hat somit folgende Gestalt

$$\mathcal{H} = \lambda \sigma_z \sum_{i=1}^n \sigma_z^{(i)} + \omega \sum_{i < j}^n \left(3\sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} - \vec{\sigma}^{(i)} \vec{\sigma}^{(j)} \right) . \quad (3.2.22)$$

Wie bereits oben angemerkt, repräsentiert der Kopplungsoperator A die z -Komponente des vollen Badspins, diese vertauscht mit dem Badoperator \mathcal{H}_b .

Somit erwarten wir, dass die Ergebnisse nicht von der Kopplungskonstante des Bades ω beziehungsweise dem Skalenfaktor α mit

$$\omega = \alpha \lambda , \quad (3.2.23)$$

abhängen.

Weiterhin soll – wie ebenfalls oben notiert wurde – durch geeignete Skalierung der Konstanten λ und ω bzw. α versucht werden, Einflüsse der Badgröße n zu minimieren oder idealerweise zu eliminieren. Dazu werden entsprechende Skalierungsfunktionen gesucht.

Da die Zahl der Kopplungen λ linear mit der Zahl der Badspins n zunimmt bietet sich im ersten Versuch eine Skalierung gemäß

$$\lambda \rightarrow \lambda/n \quad (3.2.24)$$

an.

Zum ersten Test dieser Vermutung als auch als Test der Programme wird das Verhalten bei $\alpha = 0$, also der Fall ohne Baddynamik, betrachtet.

Die Benennung der untersuchten Skalierungen erfolgt über zwei Ziffern nach dem Schema $[\lambda][\omega]$, d.h. die erste Ziffer gibt die Nummer der λ -Skalierung an, die zweite wird später die ω -Skalierung repräsentieren (siehe Abbildung 3.18). Die Ziffern selbst sind dabei willkürlich gewählt. In den jeweiligen Programmen können diese Ziffern als Kommandozeilenparameter übergeben werden. Letztendlich kann aber nur eine Skalierung geeignet sein, die Abhängigkeit der Daten von der Systemgröße zu minimieren.

Der Vergleich der Skalierungen ist in Abbildung 3.19 gezeigt. Man erkennt deutlich, dass die gewählte lineare λ -Skalierung die Abweichungen bezüglich der Systemgröße in einem weiten Bereich richtig erfasst, da die unterschiedlichen Kurven aufeinander liegen.

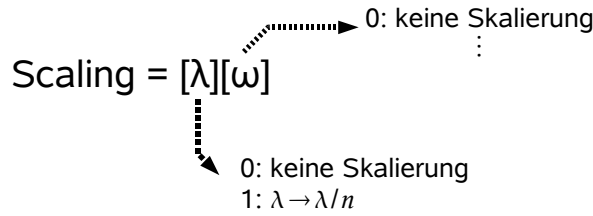


Abbildung 3.18 Schematische Darstellung der Benennung der Skalierungen.

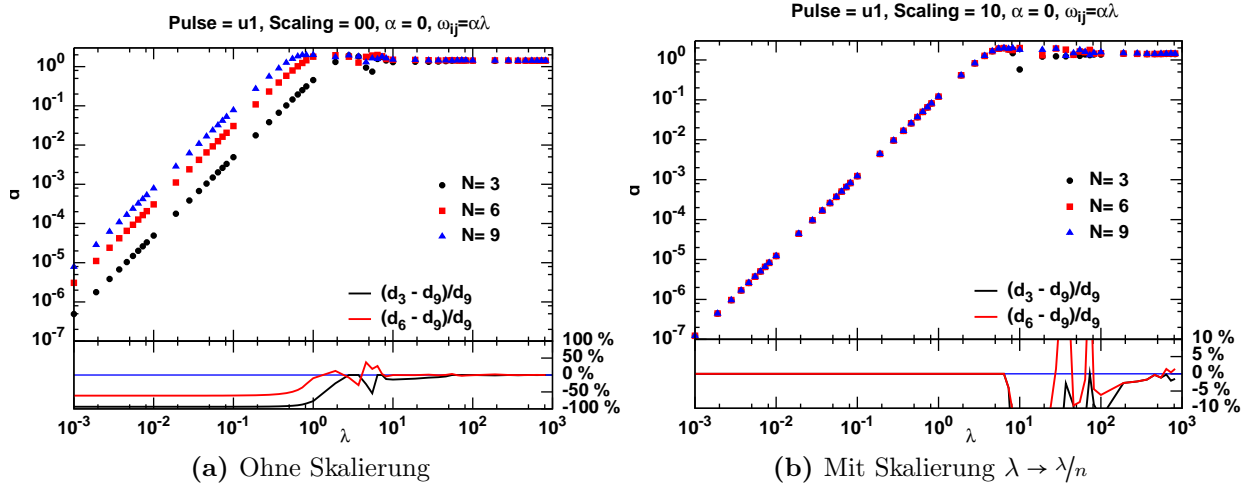


Abbildung 3.19 In den Grafiken (a) und (b) wurde das Abstandsmaß d des Pulses U1 für verschiedene Systemgrößen $N = n + 1$ gegen die Kopplungskonstante λ aufgetragen. Für Graph (a) wurden die Kopplungen λ **nicht** mit der Badgröße n skaliert, wohingegen bei (b) $\lambda \rightarrow \lambda/n$ gilt. Die jeweilige untere Abbildung stellt die relativen Abweichungen der Datensätze zum größten betrachteten N dar.

Die Bereiche, die dennoch Abweichungen zeigen $\lambda \gtrsim 5[\tau_p^{-1}]$, liegen aber – wie schon im vorangegangenen Kapitel 3.2.1 diskutiert – jenseits des Gültigkeitsbereichs unserer analytischen Rechnungen und werden daher nicht eingehender untersucht.

Im nächsten Schritt wird untersucht, ob das Bad wirklich keinen Einfluss auf die Ergebnisse hat, oder ob – aufgrund unbekannter Modelleigenschaften – dennoch eine Abhängigkeit besteht. Zudem bietet sich damit auch eine weitere Gelegenheit, die eingesetzten Programme zu testen und die Konsistenz der erzeugten Daten zu prüfen.

Die Resultate sind in Abbildung 3.20 dargestellt. Wie bereits dargelegt, zeigt sich – wie erwartet – keinerlei Veränderung hinsichtlich des Badeinflusses α . Weiterhin bestätigt sich, dass die Potenzreihenentwicklung

$$d = \sqrt{\max(\text{EigenValue}[\eta^{(2)}\eta^{(2)}])} + \mathcal{O}(\tau_p^5) \tag{3.2.25a}$$

$$= \eta_{23}\lambda^2 + \mathcal{O}(\tau_p^5) \quad \text{für } \lambda_i = \lambda \forall i, \tag{3.2.25b}$$

die ebenfalls in Abbildung 3.20 eingezeichnet wurde, über einen weiten λ -Bereich (siehe orange-farbene Kurve) Gültigkeit besitzt²³.

²³Man beachte, dass Gleichung (3.2.25b) nur im Fall $\lambda_i = \lambda$ und $\omega_{ij} = \omega \forall (i, j)$ gültig ist.

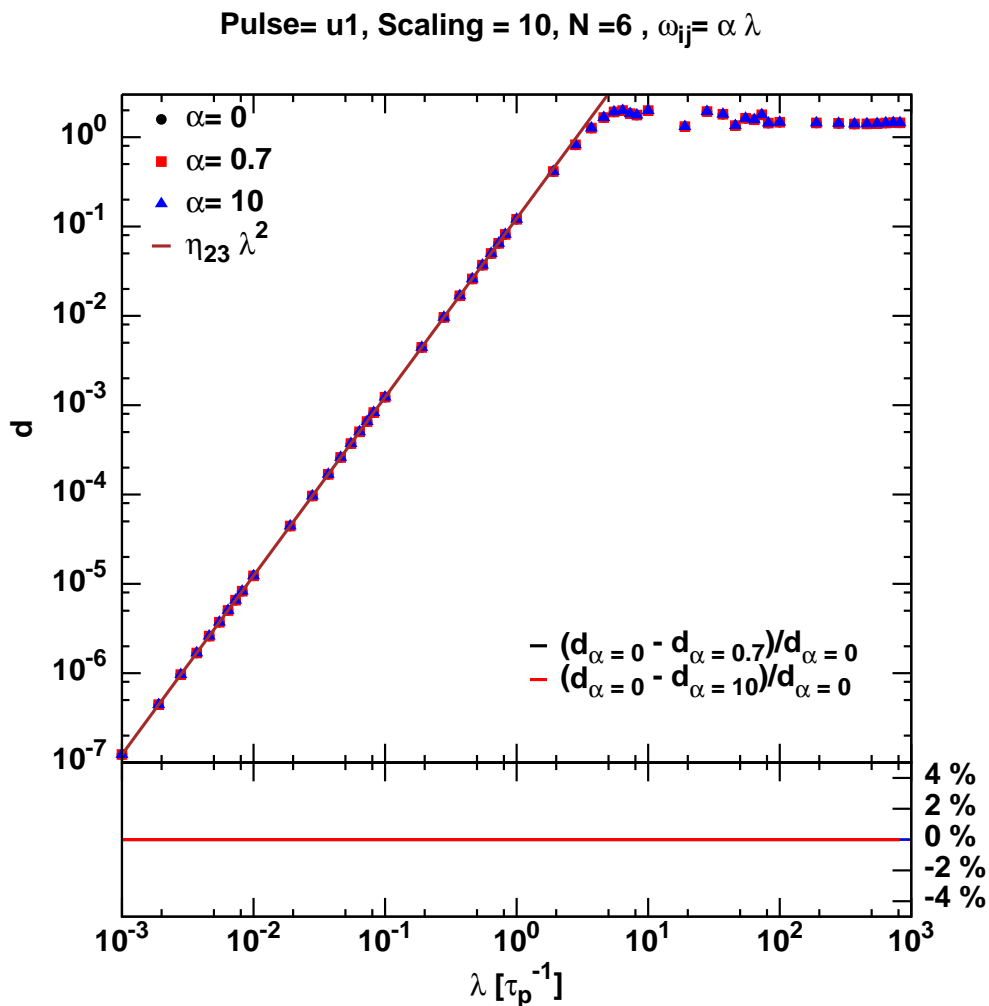


Abbildung 3.20 Das Abstandsmaß d für verschiedene Badparameter α aufgetragen gegen die Kopplung λ . Wie erwartet, zeigen sich keine Abweichungen bezüglich α . Die durchgezogene orangefarbene Linie gibt die Erwartung gemäß der analytischen Berechnungen (Gleichung (3.2.25b)) wieder ($\eta_{23}(U1) \approx 0.123$).

3.2.6.2. Zufallskopplungen (Teil 1: ohne Bad)

Im nächsten Schritt wird untersucht, wie sich die Daten verhalten, wenn die Kopplungen λ_i zufällig gewählt werden, das Bad jedoch keine Rolle spielt, d.h. $\omega_{ij} = 0 \forall (i, j)$ gilt.

Die zufällige Wahl der λ_i bedingt zusätzliche Parameter, die im Vorfeld festgelegt werden müssen. Zuerst muss entschieden werden, welche **Verteilungsfunktionen** $P(\lambda)$ bzw. Wahrscheinlichkeitsdichten $p(\lambda)$ genutzt werden sollen. Diese sollten nach Möglichkeit nahe an realen Systemen liegen, andererseits aber auch eine einfache Analyse der Ergebnisse zulassen, so dass ein besseres Verständnis des Modellsystems und seiner Parameter entsteht.

Insbesondere aus letzterem Grund werden zu Beginn eine Gleichverteilung (uniform) und eine Normalverteilung (normal) gewählt.

Auch wenn theoretische Arbeiten wie (Lacelle & Tremblay 1995) oder (Wesenberg & Mølmer

2004) komplexere Verteilungsfunktionen erwarten lassen, gehen wir davon aus, dass diese Vereinfachung bereits das typische Verhalten zeigt. Normal- und Gleichverteilung besitzen unter anderem wohldefinierte Mittelwerte, Standardabweichungen und weitere höhere Momente, was in der weiteren Analyse vieles vereinfacht.

Alternativ bieten die Programme auch die Möglichkeit die Cauchy-Lorentz-Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p_{\text{Cauchy}}(\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(\lambda - \lambda_0)^2 + \gamma^2} \quad (3.2.26a)$$

und die dazugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_{\text{Cauchy}}(\lambda) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\gamma}\right) \quad (3.2.26b)$$

zu nutzen²⁴, es wurde aber davon abgesehen, dies eingehender zu untersuchen, nachdem erste Tests mit dieser Verteilung ein sehr unübersichtliches Bild lieferten. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $p_{\text{Cauchy}}(\lambda)$ ist – der Vollständigkeit halber – in Abbildung 3.21 skizziert.

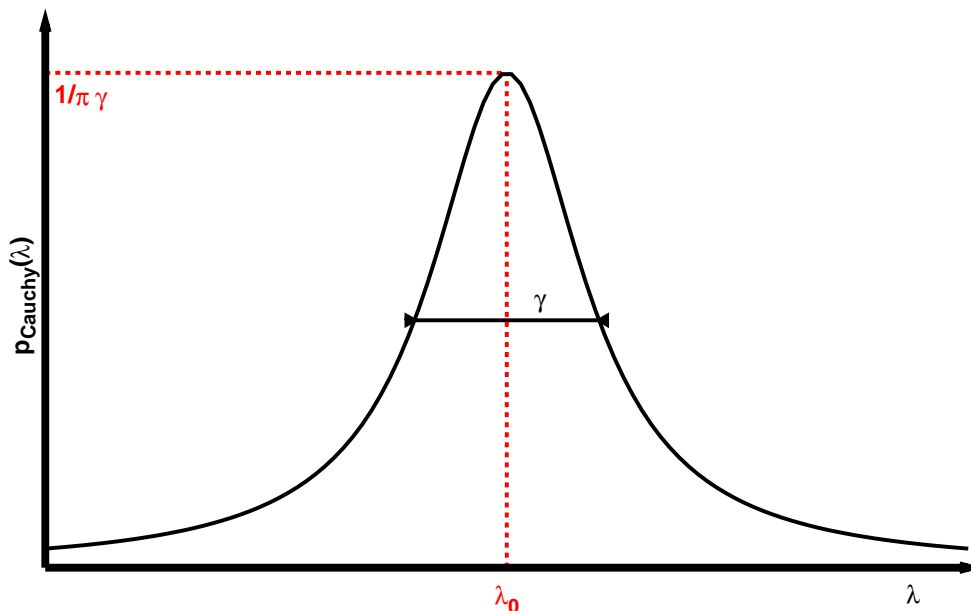


Abbildung 3.21 Skizze der Wahrscheinlichkeitsdichte p_{Cauchy} der Cauchy-Lorentzverteilung gemäß Gleichung (3.2.26a). Es sind eingetragen, die Peakposition λ_0 , der Maximalwert $1/\pi\gamma$ und die Halbwertsbreite. γ

Damit sind auch schon zwei weitere Parameter genannt: zum einen der **Mittelwert** der Verteilung, im Folgenden mit $\langle \lambda \rangle$ bezeichnet

$$\langle \lambda \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p(\lambda) \lambda \, d\lambda, \quad (3.2.27a)$$

zum anderen die **Standardabweichung** σ_λ der Verteilung

$$\sigma_\lambda = \sqrt{\langle (\lambda - \langle \lambda \rangle)^2 \rangle}. \quad (3.2.27b)$$

²⁴Die Größe λ_0 bezeichnet hier die Peakposition der Verteilung; γ repräsentiert die Halbwertsbreite.

Um – wie oben – eine einheitliche Energieskala zu gewährleisten und die Zahl der freien Parameter übersichtlicher zu gestalten, wird zusätzlich ein Skalierungsfaktor γ_λ

$$\sigma_\lambda = \gamma_\lambda \langle \lambda \rangle \quad (3.2.27c)$$

eingeführt.

In den Programmen werden Zufallsgeneratoren der Boost-Bibliothek (siehe Anhang B.1.2) benutzt. Diese ermöglichen die einfache Implementation unterschiedlicher Verteilungsfunktionen und unterschiedlicher Pseudozufallszahlengeneratoren. Diese Bibliotheken werden von einer Vielzahl an Entwicklern genutzt und seit langer Zeit weiterentwickelt, daher können die Tests der Zufallsgeneratoren auf ein Minimum beschränkt werden.

Schließlich erfolgt die Mittelwertbildung über die m Datenpunkte gemäß

$$\langle d \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m d_i . \quad (3.2.28a)$$

Der Fehler des Mittelwerts, der später als Fehlerbalken eingezeichnet wird, berechnet sich aus

$$s_d = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m (d_i - \langle d \rangle)^2}{n(n-1)}} . \quad (3.2.28b)$$

An dieser Stelle sei schon vorweggenommen, dass die so generierten Fehlerbalken oft so klein sind, dass sie aufgrund der angezeigten Größe der Datenpunkte nicht sichtbar sind.

Neben der zufälligen Wahl der λ_i wurde auch eine systematische Prozedur angewandt, die die Ergebnisse der zufällig gewählten Kopplungen möglichst gut reproduziert ohne dabei der zeitaufwändigen Mittelwertbildung bzw. der notwendigen Stichprobenerzeugung zu bedürfen.

In Folge dessen erspart man sich die aufwändige und zeitintensive Stichprobengeneration und Mittelwertbildung und kann mit nur einem Programmablauf bereits repräsentative Ergebnisse generieren.

Diese Methode nutzt inverse Verteilungsfunktionen und wird unter anderem bei Monte-Carlo-Techniken unter dem Stichwort „Inverse transform method“ (siehe Weinzierl 2000, Kap. 5.1.1) angewandt.

In den folgenden Abbildungen werden die entsprechenden Daten meist mit „inversePDF“ oder iPDF beschriftet. Die „gewürfelten“ Daten hingegen erhalten den Index/die Bezeichnung „Random“ oder RND.

Diese Methode soll nun kurz vorgestellt werden. Allgemein verändern einfache Variablentransformationen $x \rightarrow y = y(x)$ den Wert einer Mittelwertbildung über die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x)$ nicht, es gilt also

$$\bar{f} = \int_a^b p(x) f(x) dx = \int_{y(x=a)}^{y(x=b)} f(y) \tilde{p}(y) dy . \quad (3.2.29a)$$

Die Funktion

$$\tilde{p}(y) = p(x(y)) \frac{dx}{dy} \quad (3.2.29b)$$

setzt sich aus der (umgeformten) Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x(y))$ und der Jacobi-Determinante $\frac{dx}{dy}$ zusammen. Natürlich müssen auch die Integralgrenzen angepasst werden.

Gelingt es, den Anteil der Jacobi-Determinante gleich dem Inversen der Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x)$ zu wählen, also

$$p(x) = \frac{dy}{dx}, \quad (3.2.29c)$$

so stellt die rechte Seite von Gleichung (3.2.29a) das Integral über eine Gleichverteilung dar.

Dieses Ziel erreicht man durch Wahl der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} p(\lambda') d\lambda', \quad (3.2.29d)$$

die die Wahrscheinlichkeit angibt, dass die Zufallsvariable λ' höchstens den Wert λ annimmt. Wählt man anschließend

$$y(\lambda) = P(\lambda), \quad (3.2.29e)$$

so ergibt sich für die Jacobi-Determinante

$$\frac{dy}{d\lambda} = \frac{dP}{d\lambda} = p(x) \quad (3.2.29f)$$

die ursprüngliche Wahrscheinlichkeitsdichte.

An dieser Stelle ist zu betonen, dass die Existenz und die Gutartigkeit²⁵ von P^{-1} und p^{-1} implizit vorausgesetzt wurde. Ansonsten sind obige Rechnungen nicht mehr in Gänze gültig. Da hier aber lediglich die etablierte Gauß- bzw. Gleichverteilung untersucht wird, besteht kein Grund, derartige Komplikationen zu erwarten.

Die systematische Wahl der λ_i geschieht mit Hilfe der inversen Verteilungsfunktion $P^{-1}(y)$, in dem man y an äquidistanten Stützstellen y_i auswertet.

Die y_i stellen dabei Stützstellen der neuen Gleichverteilung dar. Durch die äquidistante Wahl beschränkt man sich auf eine möglichst homogen gewählte Darstellung dieser Gleichverteilung. Anschließend generiert man über die inverse Verteilungsfunktion der ursprünglichen Verteilung einen Satz an λ_i , der nun ebenfalls eine gute repräsentative Stichprobe darstellt.

Um die Daten, die auf Basis der Gleichverteilung von denen der Normalverteilung unterscheiden zu können, werden die Indizes uni bzw. norm genutzt.

Gleichverteilung

Die Rechnungen zu Gleichverteilung

$$p_{\text{uni}}(\lambda) = \frac{1}{a} \Theta(y - (\lambda) - a/2) \Theta(-y + (\lambda) - a/2) \quad (3.2.30a)$$

²⁵wie z.B. die Nullstellen der jeweiligen Funktionen

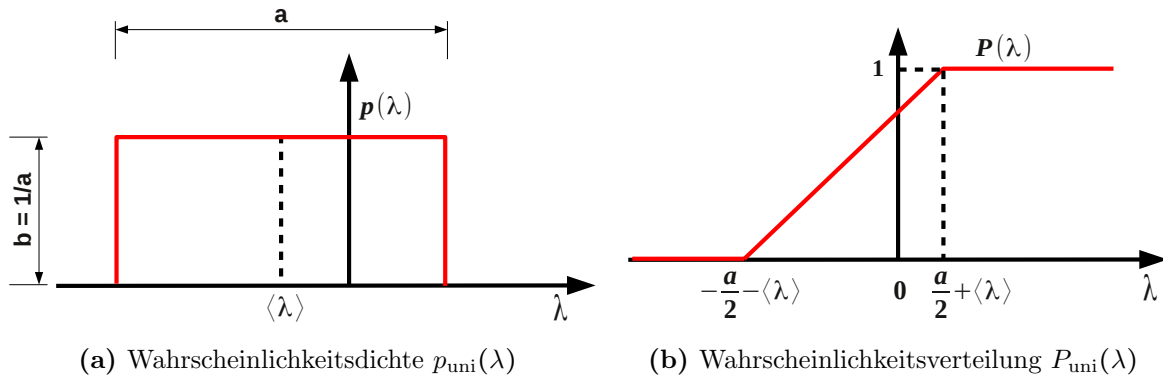


Abbildung 3.22 Skizze der Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. -verteilung der Gleichverteilung.

wie in Abbildung 3.22a skizziert, liefert mit der Breite

$$a = \sqrt{12} \sigma_\lambda \tag{3.2.30b}$$

die Wahrscheinlichkeitsverteilung (siehe auch Abbildung 3.22b)

$$P_{\text{uni}} = \begin{cases} \frac{1}{a} \left(\lambda + \frac{a}{2} + \langle \lambda \rangle \right) & \text{für } \lambda \in [-\langle \lambda \rangle - a/2 \dots \langle \lambda \rangle + a/2] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \tag{3.2.30c}$$

Die zugehörige inverse Funktion in Kombination mit äquidistanten Stützstellen

$$y_i = \frac{1}{n} \left(i - \frac{1}{2} \right) \quad i = 1 \dots n \tag{3.2.30d}$$

liefert

$$\lambda_i = \sqrt{12} \sigma_\lambda y_i - \sqrt{3} \sigma_\lambda - \langle \lambda \rangle . \tag{3.2.30e}$$

Normalverteilung

Die analogen Rechnungen zur Normalverteilung (siehe Abbildung 3.23a)

$$p_{\text{norm}}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_\lambda} \exp \left[-\frac{(\lambda - \langle \lambda \rangle)^2}{2\sigma_\lambda^2} \right] \tag{3.2.31a}$$

liefern, unter Nutzung der gaußschen Fehlerfunktion

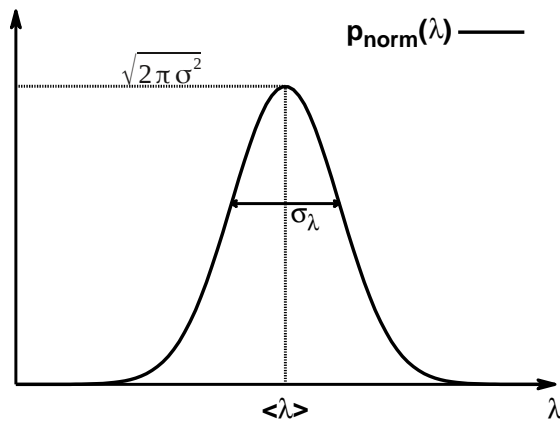
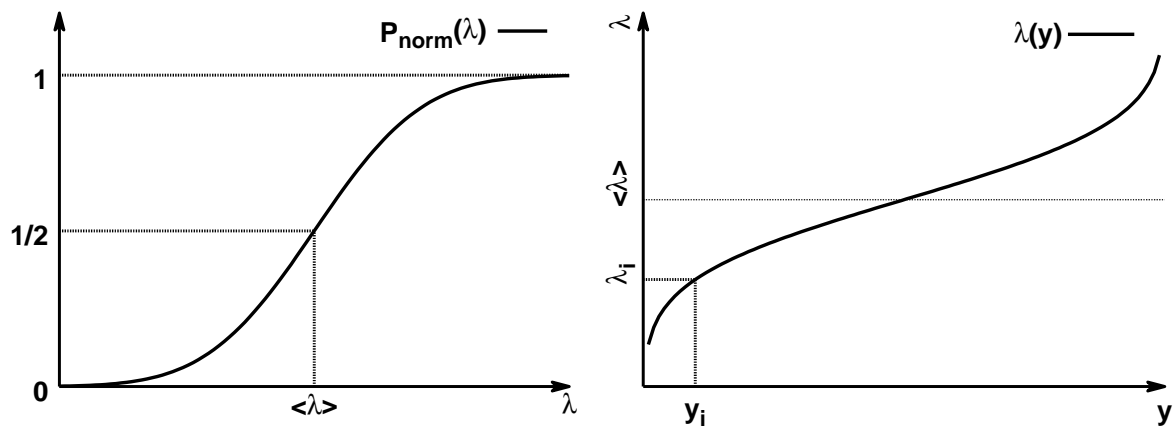
$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^x e^{-t^2} dt , \tag{3.2.31b}$$

die Verteilungsfunktion (siehe Abbildung 3.23b)

$$P(\lambda) = \frac{1}{2} \left(1 + \text{erf} \left[\frac{\lambda - \langle \lambda \rangle}{\sqrt{2} \sigma_\lambda} \right] \right) . \tag{3.2.31c}$$

Über ihre Umkehrfunktion (siehe Abbildung 3.23c) gelangt man mit den Stützstellen aus (3.2.30d) zu

$$\lambda_i = \sqrt{2} \sigma_\lambda \text{erf}^{-1}(2y_i - 1) + \langle \lambda \rangle . \tag{3.2.31d}$$

(a) Wahrscheinlichkeitsdichte $p_{\text{norm}}(\lambda)$ (b) Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_{\text{norm}}(\lambda)$ (c) inverse Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_{\text{norm}}^{-1}(y)$ **Abbildung 3.23** Skizzen der Wahrscheinlichkeitsdichte, -verteilung und der inversen Verteilungsfunktion der Normalverteilung.**Anwendung bezüglich der Potenzreihenentwicklung**

In diesem Spezialfall wird – wie bereits erwähnt – die **Baddynamik ausgeschaltet**, d.h.

$$\alpha = 0 \quad (3.2.32)$$

gewählt.

Da die Eigenwerte des Kopplungsoperators

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_z^{(i)} \quad (3.2.33)$$

bzw. des Operators A^2 bekannt sind, nämlich

$$\max[\text{EigenValue}(A)] = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \quad (3.2.34a)$$

$$\max[\text{EigenValue}(A^2)] = \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2, \quad (3.2.34b)$$

können Ergebnisse gemäß der Potenzreihenentwicklung (3.1.14a) und (3.1.14b) formuliert werden. Dies gelingt dabei sogar im Falle gewürfelter Kopplungen, so dass hier die Simulationsdaten eingehender validiert werden können. Auch der notwendige Vergleich der Methoden, d.h. iPDF gegen randomisierte/gewürfelte Kopplungen (RND) kann so auch analytisch getestet und verglichen werden.

Betrachten wir statistisch verteilte Kopplungen, so bedarf es zur Datenanalyse der Mittelwertbildung. Wir betrachten also ein gemittelttes Abstandsmaß $\langle d \rangle_{\text{RND}}$. Dabei dient der Index RND zur Unterscheidung unterschiedlich generierter Maße, die später miteinander verglichen werden sollen. Gemäß Gleichung (3.1.14b) skaliert d in zweiter Ordnung – ohne Baddynamik – mit A^2 , genauer gesagt mit dessen Eigenwerten (3.2.34b). Man erhält so

$$\langle d \rangle_{\text{RND}} = \eta_{23} \left(\left\langle \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right\rangle \right)^2 \quad (3.2.35a)$$

$$= \eta_{23} \left(n \langle \lambda \rangle^2 (\gamma_\lambda^2 + 1) + n(n-1) \langle |\lambda| \rangle^2 \right). \quad (3.2.35b)$$

Die obigen Rechnungen verlangen, dass Erwartungswert, Varianz und $\langle |\lambda| \rangle$ wohldefiniert sind und sich entsprechend gutartig verhalten. Im Falle der **Gleichverteilung** (3.2.30a) ergibt sich

$$\langle d \rangle_{\text{RND}}^{\text{uni}} = n \eta_{23} \langle \lambda \rangle^2 \left[(\gamma_\lambda^2 + 1) + (n-1) \begin{cases} 1 & \text{für } 2 \geq \sqrt{12} \gamma_\lambda \\ \left(\frac{1}{\sqrt{12} \gamma_\lambda} + \frac{\sqrt{12}}{4} \gamma_\lambda \right)^2 & \text{sonst} \end{cases} \right]. \quad (3.2.36)$$

Die Fallunterscheidung bei $2 \geq \sqrt{12} \gamma_\lambda$ ist erforderlich, da im Falle steigender γ_λ , die Kopplungen λ_i auch negative Werte annehmen können. In diesen Fällen kommt der Beitrag proportional zu $\langle |\lambda| \rangle^2$ in Gleichung (3.2.35b) zu Tragen.

Da die Normalverteilung (3.2.31a) aufgrund ihrer weiten Ausläufer prinzipiell auch immer negative λ_i zulässt, ist eine Fallunterscheidung hier nicht erforderlich

$$\langle d \rangle_{\text{RND}}^{\text{norm}} = n \eta_{23} \langle \lambda \rangle^2 \left[(\gamma_\lambda^2 + 1) + \frac{n-1}{\pi} e^{-1/\gamma_\lambda^2} \left(\sqrt{2} \gamma_\lambda + \sqrt{\pi} \operatorname{erf} \left(\frac{1}{\sqrt{2} \gamma_\lambda} \right) e^{1/2\gamma_\lambda^2} \right)^2 \right]. \quad (3.2.37)$$

Man beachte, dass in diesen Formeln noch keine Skalierung der Kopplungen $\lambda_i \rightarrow \lambda_i/n$ durchgeführt wurde.

Auch die Methode der inversen Verteilungsfunktion (iPDF) lässt sich analytisch auswerten.

Allerdings gelingt es nur im Falle der Gleichverteilung eine einfache, geschlossene analytische Form

$$d_{\text{iPDF}}^{\text{uni}} = \eta_{23} \langle \lambda \rangle^2 \begin{cases} n^2 & \text{für } 2 \geq \sqrt{12} \gamma_\lambda \\ \frac{(3n^2 \gamma_\lambda^2 + n^2 - 3\gamma_\lambda^2)^2}{12n^2 \gamma_\lambda^2} & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.2.38)$$

anzugeben.

Um Modell, Simulation und letztendlich auch die rechnerischen Überlegungen zu testen, bietet es sich an die Abweichung der beiden Methoden (RND und iPDF) voneinander zu untersuchen. Speziell die Abhängigkeit von der Badgröße n sollte hier aufschlussreich sein, da die Zahl der

Kopplungen und somit auch die Darstellung der Verteilungsfunktionen hier Grenzen der Methoden (speziell iPDF) aufzeigen könnte. Die analytische Differenz $d_{\text{RND}}^{\text{uni}} - d_{\text{iPDF}}^{\text{uni}}$ liefert

$$(d_{\text{RND}}^{\text{uni}} - d_{\text{iPDF}}^{\text{uni}}) \eta_{23} \langle \lambda \rangle^2 \begin{cases} n\gamma_\lambda^2 & \text{für } 2 \geq \sqrt{12}\gamma_\lambda \\ \frac{1}{12n^2\gamma_\lambda^2} [3n^3 (\gamma_\lambda^4 + 2\gamma_\lambda^2 - \frac{1}{3}) + 6n^2 (3\gamma_\lambda^4 + 1) + 9\gamma_\lambda^4] & \end{cases} \quad (3.2.39)$$

Die Betrachtung von $d_{\text{RND}}^{\text{norm}} - d_{\text{iPDF}}^{\text{norm}}$ gestaltet sich etwas aufwändiger, aufgrund der auftretenden Fehlerfunktion $\text{erf}(x)$ bzw. derer Inversen $\text{erf}^{-1}(x)$.

Mit Maple ist es jedoch möglich auch hier entsprechende Graphen zu generieren, deren Verlauf

$$(d_{\text{RND}}^{\text{norm}} - d_{\text{iPDF}}^{\text{norm}}) \propto n \quad (3.2.40)$$

nahelegen. Ein graphischer Vergleich ist in Abbildung 3.24 dargestellt.

Diese Betrachtung zeigt, dass iPDF und randomisierte Wahl (RND – ohne entsprechende Skalierung der Kopplungen λ_i – für große n immer stärker voneinander differieren.

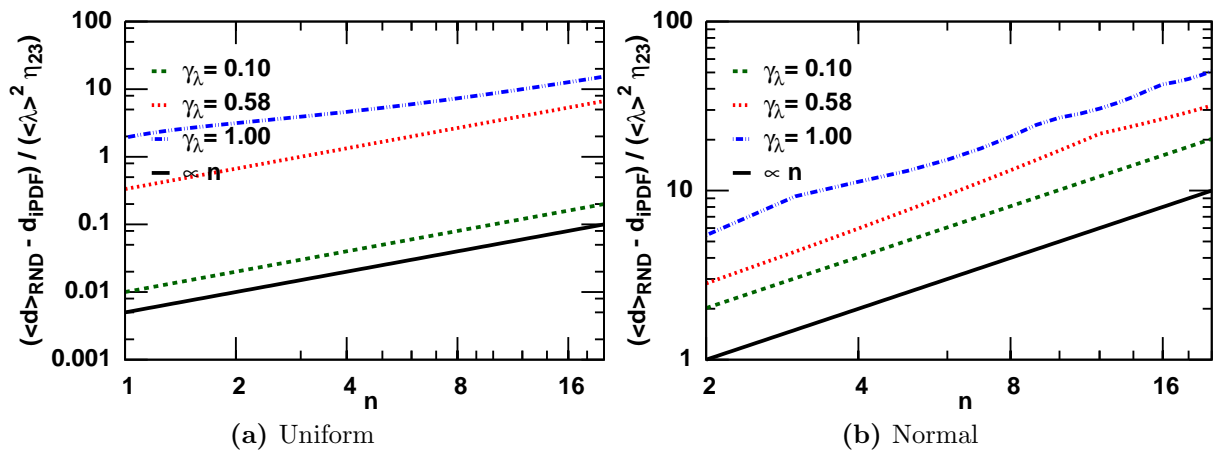


Abbildung 3.24 Vergleich der Differenzen ($d_{\text{RND}}^{\text{uni}} - d_{\text{iPDF}}^{\text{uni}}$) der Gleichverteilung (a) und ($d_{\text{RND}}^{\text{norm}} - d_{\text{iPDF}}^{\text{norm}}$) der Normalverteilung (b). Durch die Division von $\langle \lambda \rangle^2 \eta_{23}$ erhält man Ergebnisse, die unabhängig von der mittleren Kopplungskonstante $\langle \lambda \rangle$ und dem Puls zweiter Ordnung sind. Beide Graphen (doppeltlogarithmisch) zeigen in erster Näherung ein Verhalten $\Delta d \propto n$ (schwarze durchgezogene Linie).

Auch ohne diese Betrachtung, stellt man bereits in den Gleichungen (3.2.36) und (3.2.37) fest, dass bereits eine Abhängigkeit von der Systemgröße existiert. Da die genutzten Methoden aber nur relativ kleine Systeme in endlicher Zeit berechnen können, wir aber gleichzeitig bestrebt sind möglichst große Systeme²⁶ zu beschreiben, bietet es sich an, diesen Effekt durch geeignete Skalierung der Kopplungsparameter aufzufangen.

Da

$$\langle d \rangle \propto \lambda n \quad (3.2.41a)$$

²⁶Wie z.B. Quantenpunkte.

beziehungsweise

$$\langle d \rangle \propto \lambda^2 n^2 \quad (3.2.41b)$$

gilt, bietet sich eine Skalierung gemäß

$$\lambda_i \rightarrow \frac{\lambda_i}{n} \quad (3.2.42)$$

an, um mögliche Größeneffekte. Durch diese Wahl verschwinden auch die Unterschiede zwischen iPDF und RND für größere Badgrößen n , was uns gestattet später iPDF statt des aufwendigen randomisierten Verfahrens RND zu nutzen, ohne dabei Skalierungseffekte explizit im Blick halten zu müssen.

Im Folgenden wird daher, sofern nicht anders angegeben, immer die Skalierung gemäß $\lambda \rightarrow \lambda_i/n$ genutzt.

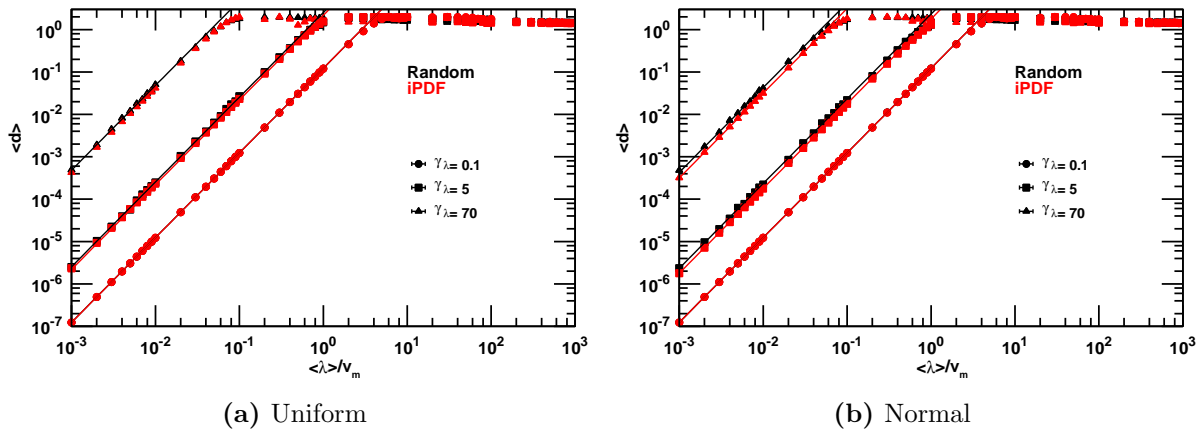


Abbildung 3.25 Vergleich der Simulationsergebnisse (Punkte) bei unterschiedlicher Erzeugung der Kopplungen λ_i (schwarz: RND, Mittelwerte aus je 200 Datenpunkten); rot: iPDF) in einem System mit fünf Badspins ($n = 5$) unter Wirkung des Pulses zweiter Ordnung U1. Die Baddynamik war dabei „ausgeschaltet“ ($\omega = 0.0$). Die Kurven zu $d_{\text{iPDF}}^{\text{norm}}$ wurden mithilfe von Maple numerisch generiert. Die Kurven für $\gamma_\lambda = 0.1$ liegen so dicht beieinander, dass eine graphische Trennung nicht möglich war.

Erster Vergleich der Pulse

Bislang wurde nicht erwähnt, inwieweit diese theoretischen Überlegungen – ausgehend von Potenzreihenentwicklung wie Gleichung (3.1.14b) – mit den Daten der vollen Zeitentwicklung übereinstimmen. Die Ergebnisse dieses Vergleichs sind in Abbildung 3.25 gezeigt und werden im Folgenden diskutiert.

Als erstes fällt die hervorragende Übereinstimmung der Simulationsdaten mit den analytischen Erwartungen (Gleichungen (3.2.36) und (3.2.37) bzw. (3.2.38)) ins Auge. Über einen großen Bereich in γ_λ erfüllen die Näherungen (3.1.14a) bzw. (3.1.14b) ihre Aufgabe erstaunlich gut und wieder ist die Gültigkeit erst kurz vor ihrer Obergrenze $d_{\text{max}} = 2$ nicht mehr gegeben.

Ebenfalls zeigt sich, dass die Unterschiede zwischen den Methoden iPDF und RND zur Erzeugung der λ_i im Falle kleiner γ_λ verschwindend gering sind und auch bei größeren γ_λ kaum ins Gewicht fallen.

Diese Aussage rechtfertigt, in den folgenden Rechnungen die schnellere Methode iPDF zur Erzeugung der λ_i zu verwenden. Dies erleichtert die folgenden Rechnungen enorm, da sonst eine noch größere Datenmenge einerseits für die λ_i und andererseits für die Badkopplungen ω_{ij} erzeugt werden müsste²⁷.

Die gleichzeitige analytische Wahl per iPDF beider Parameter ist jedoch nicht praktikabel, da nur jeweils eine Referenzverteilung gewählt werden kann, ohne die Unabhängigkeit der jeweiligen anderen Verteilungen zu stören.

Praktisch bedeutet das, dass iPDF jeweils einen festen „Gitterplatz“ x_k einer speziellen Kopplung (λ_k oder $\omega_{k,j}$) zuordnet. Würden beide Kopplungen per iPDF generiert, hat man den Zufallscharakter der jeweils anderen Kopplung reduziert, so dass hier ein randomisiertes Verhalten der Ergebnisse nicht mehr zu erwarten ist.

Im folgenden werden die λ_i meist per iPDF generiert.

Mit diesen Ergebnissen können nun erstmals verschiedene optimierte Pulse miteinander bei Abwesenheit des Bades unter zufälligen Kopplungen verglichen werden. Dies ist in Abbildung 3.26 (a) und (b) für verschiedene π - bzw. $\pi/2$ -Pulse geschehen.

Wie schon zuvor bestätigt sich das erwartete analytische Potenzverhalten, d.h. – abhängig vom Puls – $\langle d \rangle \propto \lambda$ oder $\propto \lambda^2$ oder teilweise gar höhere Potenzen, wie in den Abbildung 3.26a und 3.26b dargestellt ist.

Es bestätigen sich die Erwartungen hinsichtlich des gezeigten Potenzverhaltens im Bereich kleiner Energieskalen und es zeigt sich, dass die Anwendung optimierter Pulse deutliche Vorteile gegenüber den nichtoptimierten Pulse aufweist, da d im relevanten Bereich mehrere Größenordnungen unterhalb der nichtoptimierten SGLPi- und SGLPi2-Pulse liegen.

Im nächsten Schritt wird untersucht, ab welcher Stelle λ_m die Potenzreihenentwicklung ihre Gültigkeit verliert. Anders als zuvor wird hier nur gegen das reine Potenzverhalten getestet. Diese Näherung muss spätestens beim Maximalwert $d = 2$ ihre Gültigkeit verlieren.

Da für die Gleichverteilung eine einfache analytische Form vorliegt (3.2.38), bietet es sich an, diese zu invertieren und mit der maximalen mittleren²⁸ Kopplung $\langle \lambda_m \rangle$, die über einen numerischen Fit bestimmt wird, zu vergleichen.

Dazu wird jeweils an Datensätzen, wie sie in Abbildung 3.26 dargestellt sind, für jedes γ_λ und für jeden Puls ein Potenzgesetz $\propto \lambda^2$ angepasst. Der Bereich, in dem dieser Fit erfolgt, wird dynamisch ermittelt, nämlich so, dass die tatsächliche Abweichung des Fits $\sqrt{\chi^2}$ einen vorgegebenen

²⁷Dies stellt natürlich einen Vorgriff auf den nächsten Schritt, in dem auch der Einfluss der Baddynamik untersucht werden soll, dar.

²⁸Diese etwas sperrige Formulierung trägt der Tatsache Rechnung, dass die λ_i durch Vorgabe einer Verteilungsfunktion mit vorgegebenen Mittelwert $\langle \lambda \rangle$ und γ_λ generiert werden.

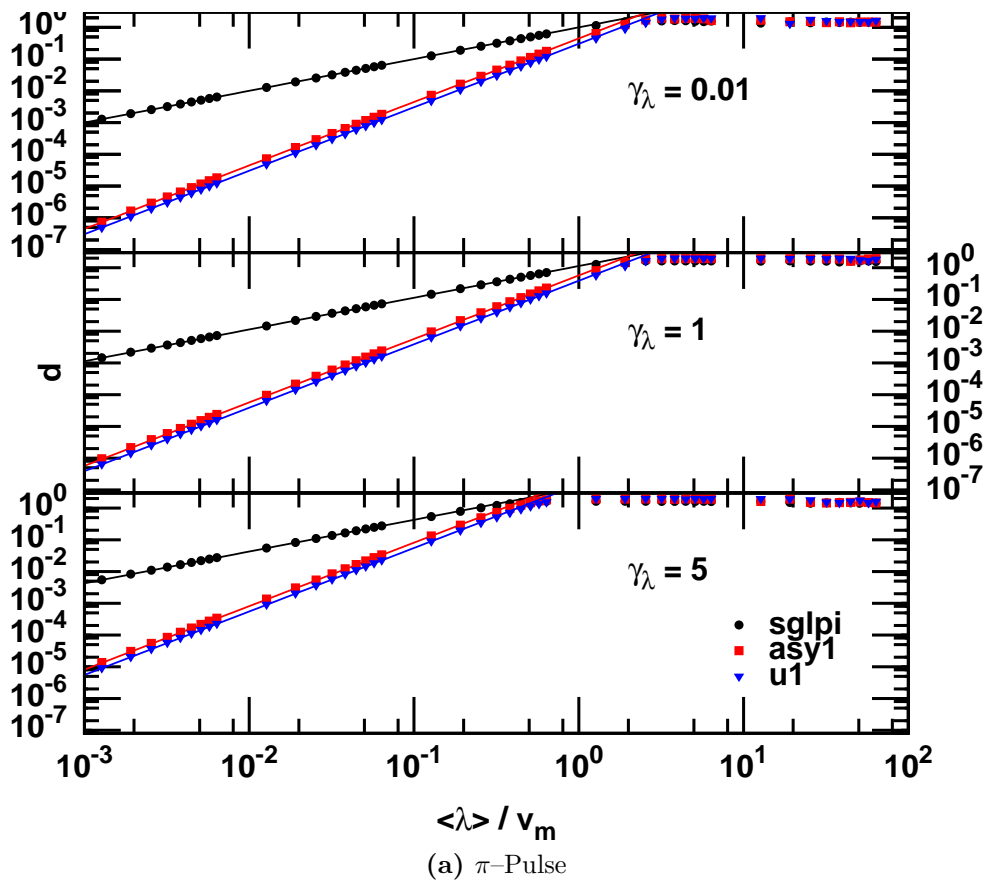


Abbildung 3.26 Vergleich unterschiedlicher π -Pulse bei unterschiedlicher Breite γ_λ der zugrundeliegenden Gleichverteilung. Die Kopplungen λ_i wurden per iPDF generiert.

Wert nicht unterschreitet. Der größte Wert des Bereichs, der dieses Kriterium erfüllt, wird mit λ_m bezeichnet.

Zusätzlich wird dieser Wert mit dem Maximalwert λ_{\max} , den man aus $d_{\max}(\lambda_{\max}) = 2$ der Potenzreihenentwicklung (Gleichung (3.1.14b)) erhält, verglichen.

Dieses geschieht mit dem Programm `datafit`, das in Anhang B.3.3 näher vorgestellt wird. Die resultierenden Daten ist in Abbildung 3.27 gezeigt.

Hier erstaunt abermals die gute Übereinstimmung zwischen theoretisch möglicher und „gemessener“ Obergrenze der Potenzreihenentwicklung.

Das Plateau, das sich im Bereich $\gamma_\lambda < 1$ ausbildet, lässt sich dadurch erklären, dass ab einem gewissen γ_λ -Wert die Verteilung der λ_i so scharf ausgebildet ist, dass sich an den Ergebnissen kaum noch Änderungen ergeben.

Man lasse sich nicht davon täuschen, dass die Kurven scheinbar sehr stark voneinander abweichen, dies hat mehrere Ursachen, auf die ich im Folgenden eingehe.

- Zur dynamischen Bestimmung von λ_m muss die Fitgenauigkeit ($\sqrt{\chi^2}$) vorgegeben werden. In Abbildung 3.27 betrug sie 0.05. Variiert man diese Schranke „nach oben“ oder „nach unten“, verändert sich auch die Lage der jeweiligen Datenpunkte kaum.

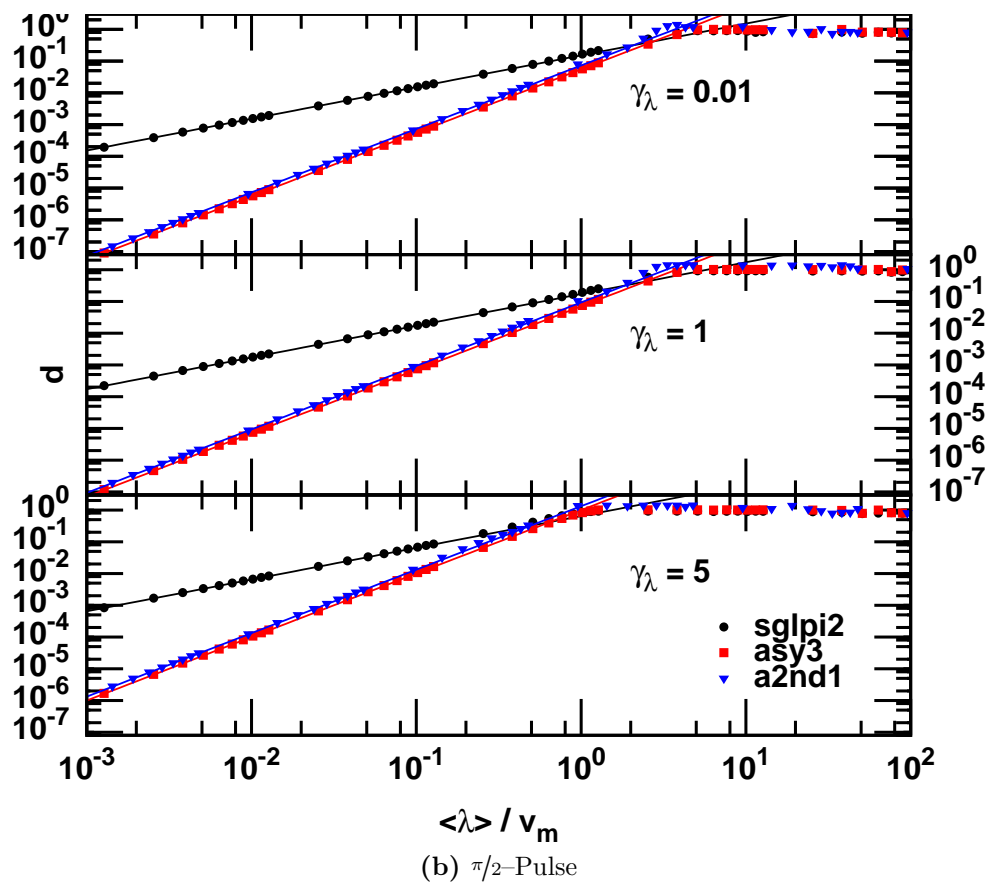


Abbildung 3.26 Vergleich unterschiedlicher Pulse (π - (a) und $\pi/2$ -Pulse (b)) bei unterschiedlicher Breite γ_λ der zugrundeliegenden Gleichverteilung. Die Kopplungen λ_i wurden per iPDF generiert.

- Die Datenbasis des Fits umfasst nur eine endliche Zahl an Datenpunkten, mit konstantem, relativen Abstand pro λ -Dekade. Dieses Vorgehen führt dazu, dass die Obergrenze λ_m auch nur bis zu diesem Abstand (in Abbildung 3.27 auf etwa ± 0.3) genau bestimmt werden kann. Eine Extrapolation wie in Abschnitt 3.2.2.1 wurde hier nicht vorgenommen; es findet lediglich ein Punkt-zu-Punkt-Vergleich statt.

Behält man dies im Blick, erstaunt abermals die hohe Übereinstimmung der analytischen Resultate mit den Simulationsdaten, wenngleich – wie zu erwarten war – die tatsächliche Obergrenze die theoretisch mögliche nicht erreicht. Insbesondere für die untersuchten $\pi/2$ -Pulse sind hier deutliche Abweichungen erkennbar.

3.2.6.3. Zufallskopplungen (Teil 2: mit einfacher Baddynamik)

Um die Lesbarkeit des Textes zu erhöhen, wird im Folgenden häufig darauf verzichtet, die Erwartungswerte $\langle d \rangle$ oder $\langle \lambda \rangle$ explizit als Erwartungswerte $\langle \cdot \rangle$ zu kennzeichnen. Statt dessen wird oft nur von d oder λ gesprochen, es sind aber deren Erwartungswerte gemeint.

Nachdem das System ohne Wechselwirkung der Badspins untereinander getestet wurde, wird im nächsten Schritt der Fall einer konstanten Kopplungskonstante

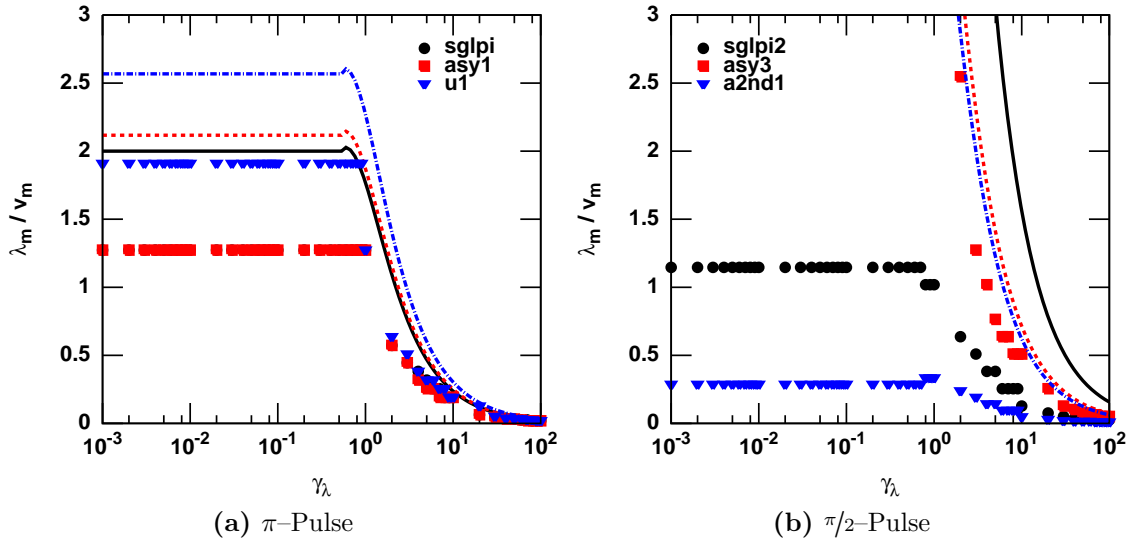


Abbildung 3.27 Vergleich der maximalen Gültigkeit der Potenzreihenentwicklung $d_{\max}(\lambda_m) = 2$ (farbige Linien) mit der dynamisch bestimmten Gültigkeitsgrenze eines gefitteten Potenzgesetzes (farbige Punkte), das jeweils an Daten – wie in Abbildung 3.26 gezeigt – für unterschiedliche Verteilungsbreiten γ_λ einer Gleichverteilung angepasst wurde.

$$\omega_{ij} = \omega \quad \forall i, j \quad (3.2.43)$$

angegangen. Neben Fragen hinsichtlich der Qualität der analytischen Näherungen verglichen mit der vollen Zeitentwicklung, stellt sich hier die Frage, ob und wie eine Abhängigkeit der Ergebnisse von der Systemgröße vorliegt. Und ob bzw. wie dies durch Skalierung der ω_{ij} erfasst werden kann. Der Badterm $\propto [\mathcal{H}_b, A]$, der bei der Berechnung der zweiten Ordnung $\eta^{(2)}$ (Gleichung (2.1.38b)) auftritt, lässt sich – wie auch seine Eigenwerte – analytisch angeben

$$[\mathcal{H}_b, A] = \left[\sum_{i<j}^n \omega_{ij} \left(3\sigma_z^{(i)}\sigma_z^{(j)} - \bar{\sigma}^{(i)}\bar{\sigma}^{(j)} \right), \sum_i^n \lambda_i \sigma_z^{(i)} \right] \quad (3.2.44a)$$

$$= - \left[\sum_i^n \lambda_i \sigma_z^{(i)}, - \sum_{i<j} \omega_{ij} \left(\sigma_x^{(i)}\sigma_x^{(j)} + \sigma_y^{(i)}\sigma_y^{(j)} \right) \right] \quad (3.2.44b)$$

$$= 2i \sum_i \lambda_i \left(\sum_{j \neq i} \omega_{ij} \left(\sigma_y^{(i)}\sigma_x^{(j)} - \sigma_x^{(i)}\sigma_y^{(j)} \right) \right). \quad (3.2.44c)$$

Seine Eigenwerte, die mit Hilfe von Maple berechnet wurden, lauten

$$\text{EigenValue}([\mathcal{H}_b, A]) = \begin{cases} 0 \\ \pm 4 \sqrt{-\sum_{i<j} \omega_{ij}^2 (\lambda_i - \lambda_j)^2} \end{cases}, \text{ oder} \quad (3.2.44d)$$

Obwohl damit die einzelnen Eigenwerte der Beiträge der zweiten Ordnung

$$\eta^{(2)} = i(\eta_{21}\sigma_x + \eta_{22}\sigma_z)\lambda[\mathcal{H}_b, A] + \eta_{23}\sigma_y\lambda^2 A^2 \quad (2.1.38b)$$

bekannt sind²⁹, gelang es nicht, eine analytische Formel des **vollen** Operators $\eta^{(2)}$ zu finden.

²⁹Der Term proportional zu A^2 wurde in Gleichung (3.2.34b) vorgestellt.

Daher wird später – beim Vergleich der Pulse – auf einen quantitativen Vergleich zwischen Potenzreihenentwicklung und voller Zeitentwicklung verzichtet. Ich beschränke mich auf einen qualitativen Vergleich bzgl. der Analyse des Potenzverhaltens.

Abhängigkeit von der Systemgröße

Wie bereits angesprochen, steht zu erwarten, dass die nun vorhandene Baddynamik eine Abhängigkeit der Ergebnisse von der System- bzw. Badgröße n bedingt.

Einerseits gilt es zu klären, ob und in welcher Form sich diese Abhängigkeit manifestiert. Andererseits wird auch anschließend untersucht, ob und wie diese Abhängigkeit durch Skalierung der ω_{ij} erfasst werden kann.

An der bewährten Skalierung der Kopplungen $\lambda_i \rightarrow \lambda_i/n$ wird dabei festgehalten.

Betrachtet man Gleichung (3.2.44d), so liegt es nahe, die ω_{ij} keiner Skalierung zu unterziehen. Die Zahl der Terme innerhalb der Wurzel beträgt $\frac{n}{2}(n-1)$, dies wird aber durch λ_i/n kompensiert.

Die Ergebnisse (Abbildung 3.28a) zeigen hingegen, dass diese Annahme **nicht zutrifft**.

Die alleinige Skalierung der λ_i führt also nicht zum gewünschten größeninvarianten Ergebnis. Ich gehe davon aus, dass dies der Struktur des vollen Operators $\eta^{(2)} = \dots [\mathcal{H}_b, A] + \dots A^2$ geschuldet ist, die eine unbekannte Abhängigkeit der Eigenwerte von n erzeugt.

In Folge dessen wurden verschiedene Skalierungen für ω geprüft. Dabei wurden diverse sinnvoll erscheinende Skalierungsfunktionen aufgestellt und anschließend geprüft. Eine Übersicht der verwendeten Nomenklatur ist in Abbildung 3.29 gegeben.

Nach vielen Tests, erwies sich schlussendlich erwies sich Skalierung 16

$$\omega_{ij} \rightarrow \omega_{ij}/\sqrt{n} \quad (3.2.45)$$

als die bestmögliche unter den untersuchten Ansätzen.

Dies ist in Abbildung 3.28b dargestellt. Nichtsdestotrotz ist diese Skalierung rein **empirischen Ursprungs** und weist nach wie vor eine geringe Abhängigkeit der Ergebnisse von der Systemgröße N bzw. der Badgröße $n = N - 1$ auf.

Abhängigkeit vom Badparameter α

Wie schon in Kapitel 3.2.1 vorgenommen, bietet sich auch hier an, Baddynamik und Kopplung der gleichen Energieskala zu unterwerfen, d.h.

$$\omega = \alpha \cdot \langle \lambda \rangle \quad (3.2.46)$$

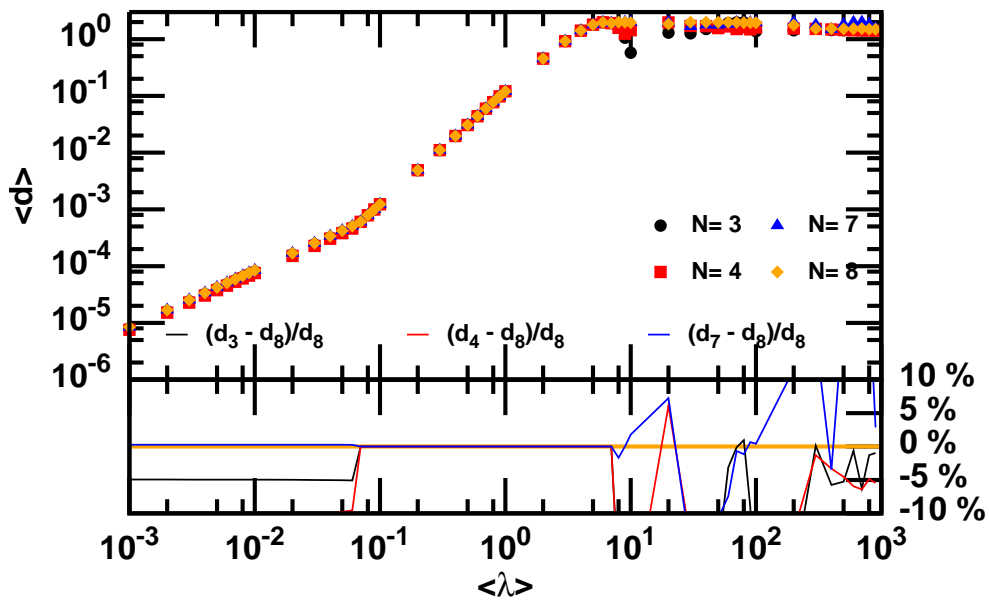
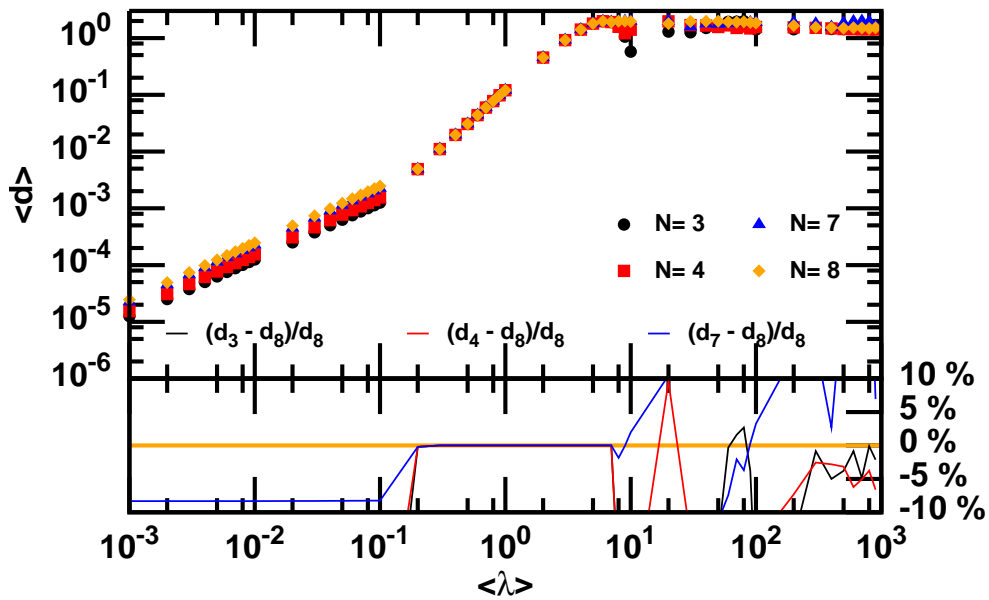


Abbildung 3.28 Skalierungsverhalten des Pulses U1 für unterschiedliche Systemgrößen N bei konstanter Badankopplung $\omega = 0.5\tau_p^{-1}$ und gleichbleibender Verteilungsbreite $\gamma_\lambda = 0.1$. Die Kopplungen λ_i wurden über die inverse Gleichverteilungsfunktion (iPDF, uniform) generiert. Der obere Graph gibt das Abstandsmaß d als Funktion des Erwartungswertes $\langle \lambda \rangle$ wieder. Der untere Graph zeigt die prozentuale Abweichung der Kurven für $N = 3, 4$ und 7 von der Kurve für $N = 8$.

zu definieren. Berechnet man das Abstandsmaß d in Abhängigkeit von α , also bei festem $\langle \lambda \rangle = 0.01$ und $\gamma_\lambda = 0.1$, so ergeben sich die Abbildungen 3.30 (a) bis (h).

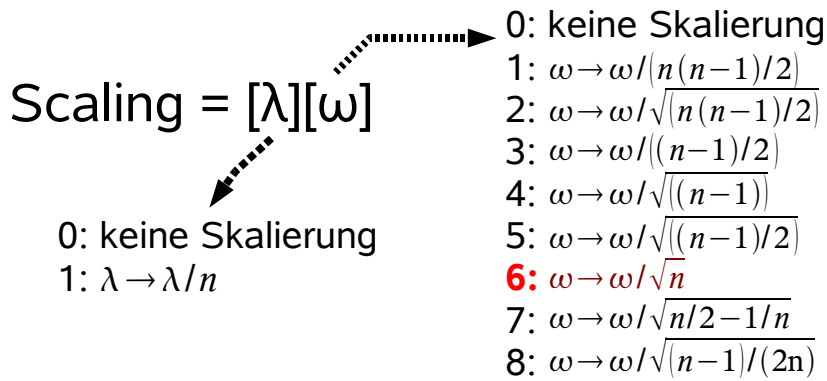


Abbildung 3.29 Nomenklatur der verwendeten Skalierungsschemata. Die erste Ziffer gibt die Skalenfunktion der λ -Kopplungen an, die zweite die der ω_{ij} .

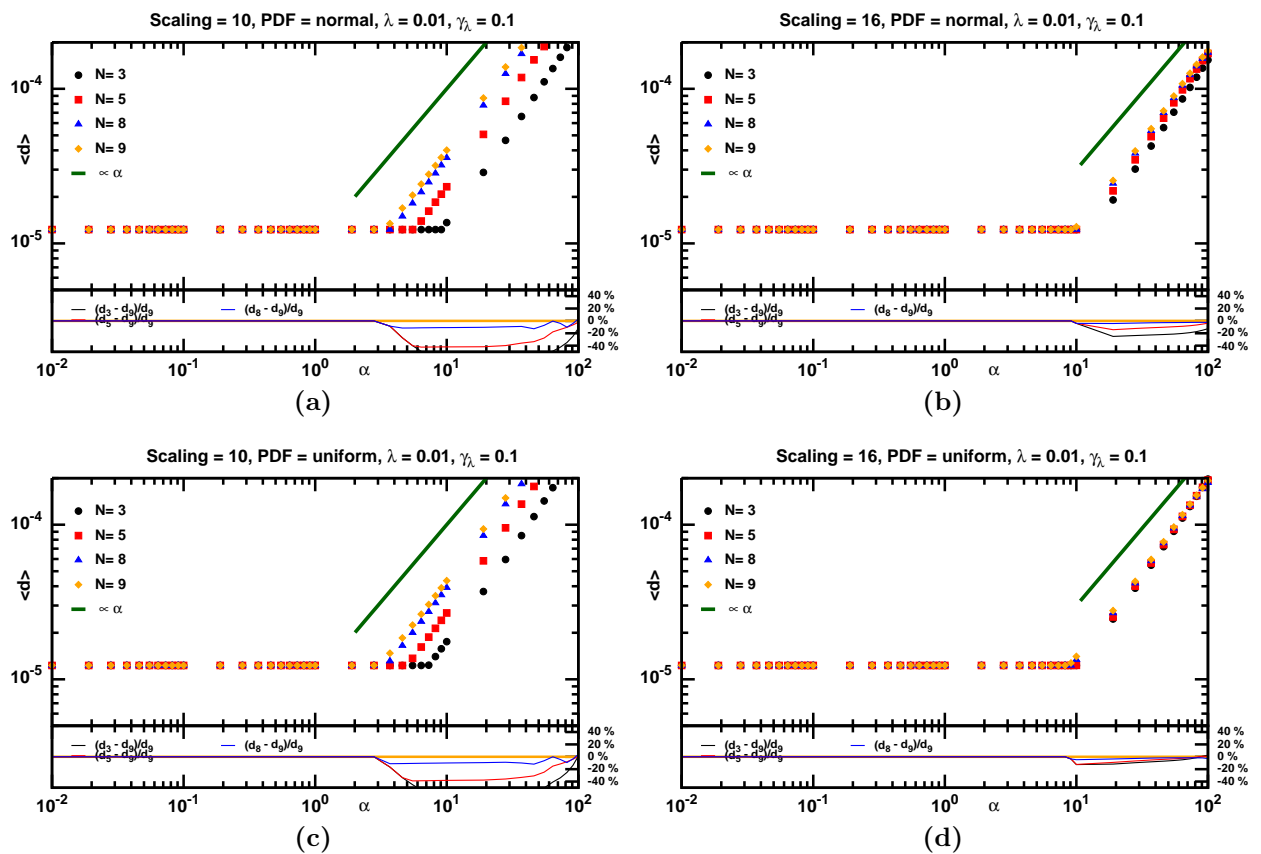


Abbildung 3.30 Skalierungsverhalten des Pulses U1 für unterschiedliche Systemgrößen N bei konstantem $\langle \lambda \rangle = 0.01$ und $\gamma_\lambda = 0.1$. Weitere Erläuterung auf der folgenden Seite

Die gewählte Skalierung $\omega \rightarrow \omega/\sqrt{n}$ zeigt auch in Abbildung 3.30 eine Reduktion der Größenabhängigkeit, liefert aber keine hundertprozentige Übereinstimmung der Kurven.

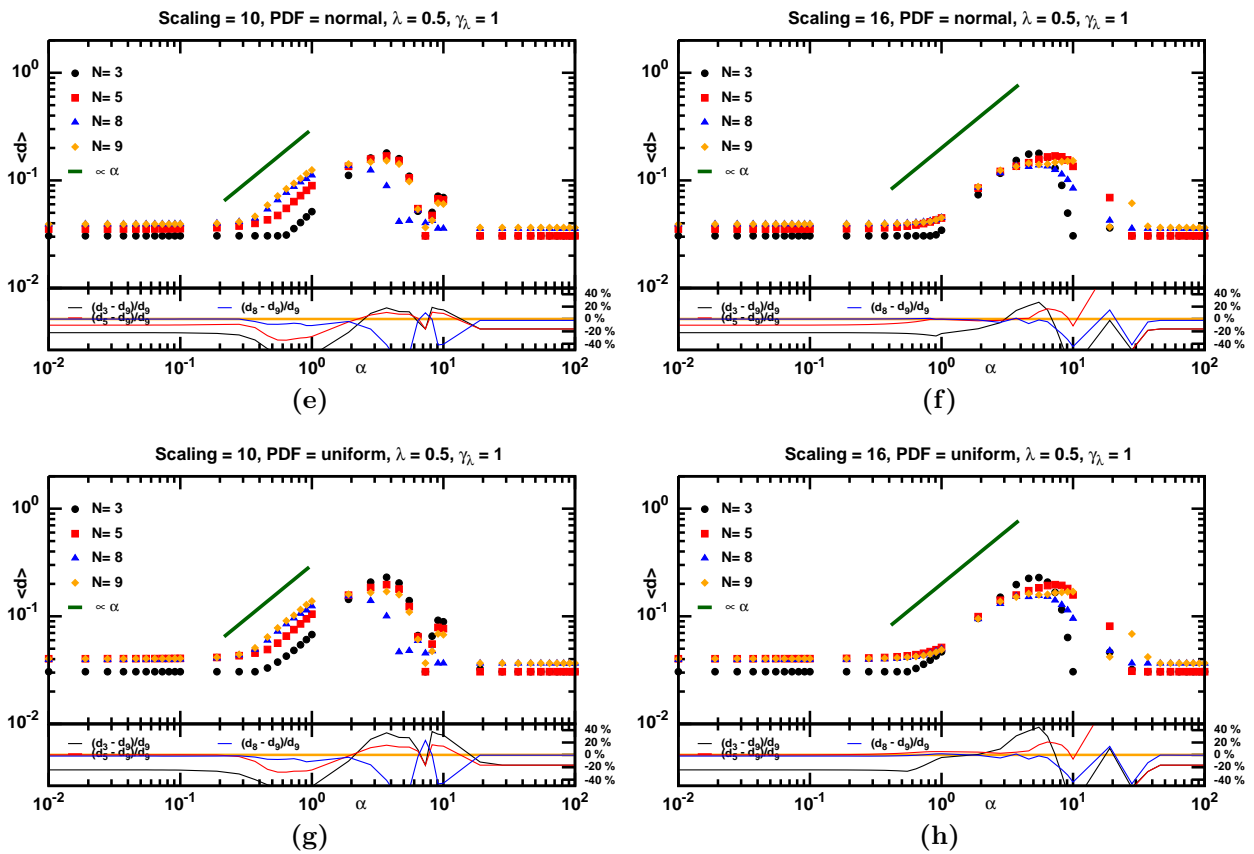


Abbildung 3.30 Skalierungsverhalten des Pulses U1 für unterschiedliche Systemgrößen N bei konstantem $\langle \lambda \rangle = 0.01$ und $\gamma_\lambda = 0.1$. Die Kopplungen λ_i wurden über inverse Verteilungsfunktionen (iPDF) einer Gleich- bzw. Normalverteilung (uniform, normal) generiert. Der jeweils obere Graph gibt das Abstandsmaß d als Funktion des Skalierungsparameters α wieder. Der untere Graph zeigt die prozentuale Abweichung der Daten für $N=3, 5$ und 8 und von der Kurve für $N=9$. Als Hilfslinie wurde jeweils in dunkelgrün eine lineare Funktion in α eingezeichnet. Weitere Erläuterungen sind im Text gegeben.

Da keine bessere Skalierungsfunktion gefunden wurde, muss dieser Zustand vorerst hingenommen werden und kann – vielleicht – erst in nachfolgenden Arbeiten adressiert werden.

Im Bereich kleiner Badparameter α erkennt man in den Abbildungen 3.30 fast konstante Werte für d . Dies rührt daher, dass in diesem Bereich der Badeinfluss so gering ist, dass es kaum Einfluss auf das Qubit ausübt. Die geringen Abweichungen der Kurven voneinander rühren von den oben angesprochenen Skalierungseffekten mit der Systemgröße N , die nicht vollständig ausgeglichen werden konnten.

In dem anschließenden Bereich gewinnt das Bad zunehmend an Einfluss. Gemäß des Entwicklungoperators $\eta^{(2)}$ (Gleichung (2.1.38)) erwartet man hier einen linearen Anstieg mit α für den Puls U1. Die Abweichungen von diesem Verhalten werden in diesem Bereich durch Korrekturen höherer Ordnung beziehungsweise numerischer Einflüsse niedriger Ordnung erklärt.

Für steigende α (Abbildungen 3.30e bis (h)) nimmt d zwischen $\alpha \approx 1 \dots 10$ aber ein Maximum an.

Dieses auffällige Verhalten hat zwei mögliche Ursachen.

- Entweder handelt es sich um einen Effekt, der der Zielsetzung der untersuchten Pulse – also der Entkopplung von freier Evolution und Puls – geschuldet ist.
- Oder es tritt auf Grund von „motional averaging“ α -abhängige Re- bzw. Defokussierung auf.

Der erste Punkt, also hinsichtlich der Zielsetzung, begründet sich wie folgt. Im Bereich kleiner $\alpha < 0.1$ fällt die Baddynamik auf Grund der geringen Kopplungsstärke $\omega = \alpha\lambda < 0.001$ kaum ins Gewicht. Umgekehrt, ist bei sehr großen $\alpha > 10$ die Baddynamik der entscheidende Anteil. In dem Zwischenbereich haben beiden in etwa die gleiche Größenordnung und können kumulativ wirken.

Die Zielsetzung des Pulses U1 liegt in der Entkopplung der Pulswirkung und der freien Zeitentwicklung. Ist entweder die Kopplung λ selbst numerisch sehr klein, oder aber ist sie verglichen mit der Baddynamik ω nicht von Bedeutung, ist dieses Ziel schon vom Modell her erreicht. Dies könnte daher eine mögliche Erklärung des abgebildeten Maximums in d zwischen $\alpha \approx 1 \dots 10$ in Abbildung 3.30 darstellen.

Andererseits ist auch nicht auszuschließen, dass das Modell selbst in diesem Parameterbereich eine defokussierende Wirkung auf das Qubit unter Pulswirkung ausübt und so den Anstieg und Fall in d erklären kann.

Weiterhin erkennt man an dieser Auftragung, dass Normalverteilung und Gleichverteilung im Vergleich zueinander nur geringe Abweichungen aufweisen.

Für größere Systeme wird erwartet, dass die Unterschiede deutlicher ausfallen, da d maßgeblich vom größten Eigenwert des Hamiltonoperators abhängt und dieser durch die größtmögliche Kopplung beeinflusst wird. Die größtmögliche Kopplung hängt aber einerseits von der Verteilungsbreite γ_λ aber auch der Verteilung selbst ab. Die Normalverteilung lässt – auf Grund ihrer weiten Ausläufer (siehe Abbildung 3.23a) – hier größere Werte als die Gleichverteilung zu. Die Skalierung der $\lambda \rightarrow \lambda/n$ minimiert diesen Effekt aber.

Vergleich der Pulse

Nachdem die Skalierungsfrage hinreichend geklärt ist, folgt der Vergleich der Pulse untereinander bzw. der Vergleich der analytisch bekannten Potenzreihenentwicklung mit den Daten der vollen Zeitentwicklung.

Dieser Vergleich ist exemplarisch in den Abbildungen 3.31a und (b) für π - bzw. $\pi/2$ -Pulse dargestellt.

Wie zu erwarten war, zeigen sich wesentliche Abweichungen von der Potenzreihenentwicklung erst bei steigendem Badeinfluss $\alpha \gg 1$.

Bis dahin ist augenscheinlich keine Abweichung erkennbar.

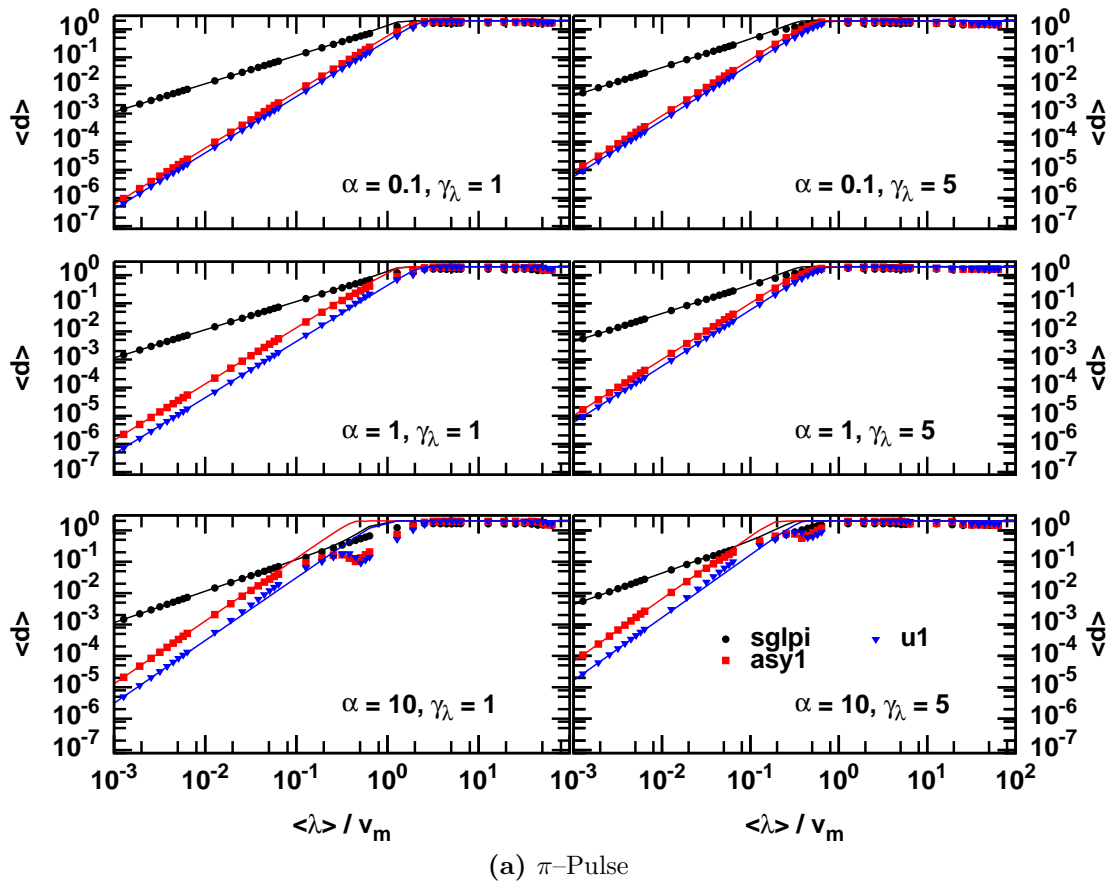


Abbildung 3.31 Vergleich verschiedener π -Pulse für unterschiedliche Parameter γ_λ und α . Weitere Erläuterungen auf der nächsten Seite

Erfreulicherweise erkennt man auch, dass der optimierten $\pi/2$ -Pulse A2nd1 in einem gewissen Bereich mit λ^3 skaliert.

Dies war auf Grund seiner Entwicklungskoeffizienten $\eta_{21} \approx \eta_{22} \approx 0$ und $\eta_{23} = 0.017$ im Bereich kleiner λ zu erwarten.

Anders als bisher, stehen nun zwei Parameter α und α_l zur Verfügung. Eine einfache zweidimensionale Darstellung der Ergebnisse reicht also nicht aus, den Einfluss beider Parameter zu untersuchen. Stattdessen bietet sich ein dreidimensionaler Plot an, in dem – abhängig von α bzw. γ_λ – die obere Fitgrenze λ_m aufgetragen wird.

Wie schon auf Seite 3.2.6.2 wird diese obere Fitgrenze dynamisch als der Wert λ_m bestimmt, ab dem $\sqrt{\chi^2}$ eines quadratischen Fits an die Daten eine vorgegebene Obergrenze 0.01 überschreitet. Die Daten in ihrer dreidimensionalen Darstellung finden sich in Abbildung 3.32.

Wie erwartet, nimmt mit steigendem Badeinfluss α und steigender Verteilungsbreite γ_λ der Gültigkeitsbereich der Potenzreihenentwicklung deutlich ab.

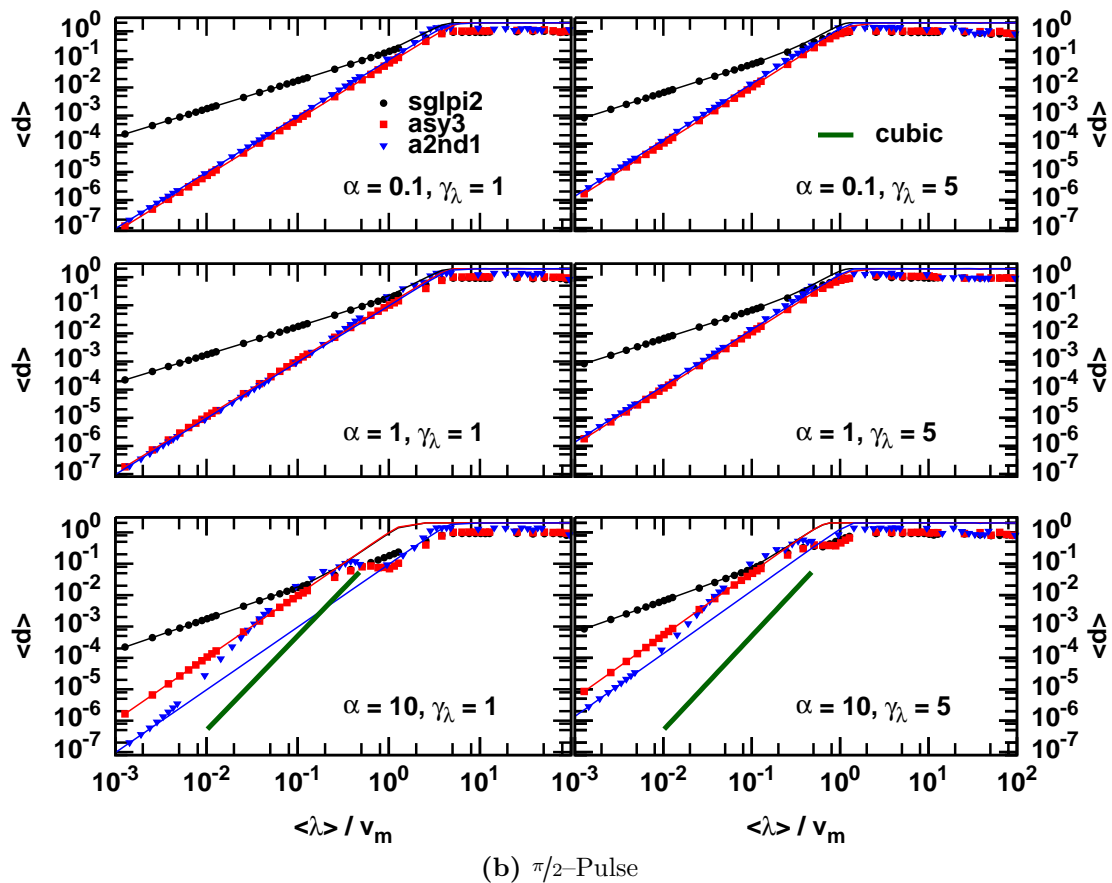


Abbildung 3.31 Vergleich verschiedener Pulse für unterschiedliche Parameter γ_λ und α . Das Bad wurde hierbei mit einer Kopplung $\omega_{ij} = \omega = \alpha \langle \lambda \rangle$ angekoppelt. Die entsprechenden farbigen Kurven repräsentieren die Werte der Magnitudenentwicklung zweiter Ordnung gemäß Gleichung (2.1.31). Die orangefarbene Linie in den unteren Graphen von (b) skizziert eine Funktion $\propto \lambda^3$, da hier die zweite Ordnung allein nicht zur Beschreibung der Daten ausreicht. Diese Daten wurden unter Anwendung von iPDF bei einer Gleichverteilung für $N = 7$ Spins erzeugt, die Skalierung folgte dabei Schema 16. Da PiSymm3rdC und PiSymm2ndC Pulse dritter Ordnung sind, sind sie durch die zweite Ordnung (blaue Kurve) nicht beschreibbar.

Nichtsdestotrotz überzeugt auch hier der große Bereich, in dem die Obergrenze λ_m/v_m oberhalb von $\lambda > 1.0$ liegt. Für den Puls ASY3 (Abbildung 3.32d) wird sogar ein Wert von $\lambda_m \approx 5$ erreicht.

Dies liegt jenseits der Erwartungen und zeigt das große Potential der Potenzreihenentwicklung und so auch der zugrundeliegenden Rechnungen bzw. der daraus abgeleiteten Pulse.

3.2.6.4. Zufallskopplungen (Teil 3: Zufällige Badkopplungen)

In diesem Abschnitt wird untersucht, wie und ob sich die Ergebnisse der vorangegangenen Kapitel ändern, wenn auch die ω_{ij} zufällig gewählt werden.

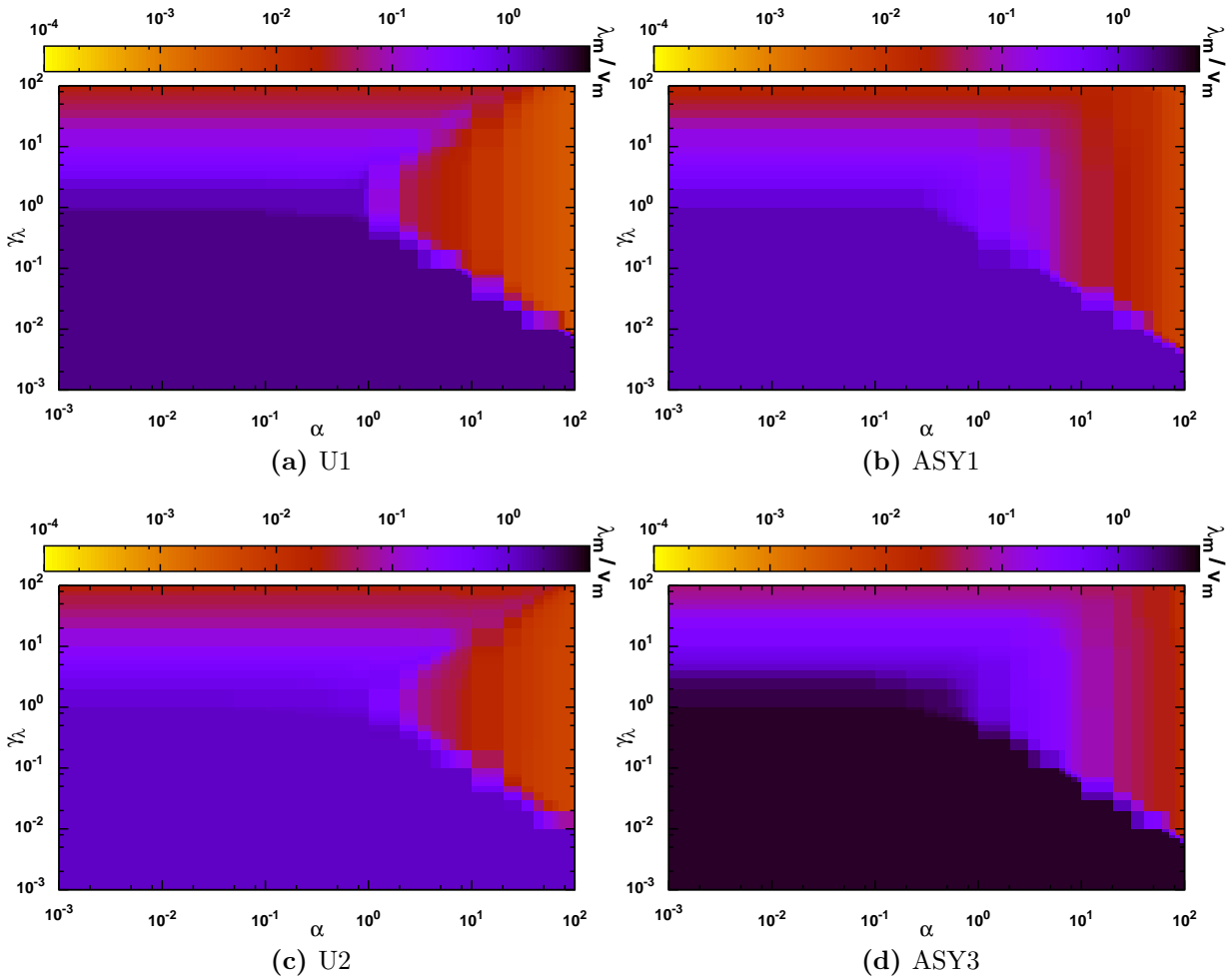


Abbildung 3.32 Farbdarstellung der oberen Fitgrenze λ_m/v_m (v_m : maximale Feldamplitude) bestimmt an einem System von $N = 7$ Spins. Die Kopplungen λ_i wurden per iPDF, die Baddynamik über $\omega_{ij} = \omega = \alpha\langle\lambda\rangle$ generiert. Die Genauigkeit der numerischen Anpassungen beträgt $\sqrt{\chi^2} = 1 \times 10^{-2}$, der Exponent des angepassten Potenzgesetzes war dabei auf 2 festgelegt. Die Daten wurden per iPDF einer Normalverteilung für ein System von $N = 7$ Spins mit Skalierung 16 erzeugt.

Hierzu wird ein weiterer Parameter γ_ω

$$\sigma_\omega = \gamma_\omega \langle \omega \rangle = \gamma_\omega \alpha \langle \lambda \rangle \quad (3.2.47)$$

eingeführt, der die Varianz der Verteilung σ_ω der ω_{ij} definiert.

Der Einfachheit halber werden die ω_{ij} gemäß der gleichen Verteilung wie der der λ_i generiert. Dies ist auch in sofern sinnvoll, da auf den ersten Blick kein zwingender physikalischer Grund besteht, der eine andere Kopplungsverteilung der Baddynamik verglichen mit der der Ankopplung des Bades an das Qubit erzwingt.

Um Rechenzeit zu sparen, werden die λ_i im Folgenden nur durch die iPDF-Methode generiert. Durch diese Wahl der λ_i wird die freie Wahl der Gitterpositionen i bzw. j so eingeschränkt, dass nun die ω_{ij} wirklich per Zufallszahlengenerator (siehe Abschnitt B.1.2) bestimmt werden müssen. Es führt also kein Weg an statistischer Datenanalyse vorbei.

Der zu bestimmende Mittelwert $\langle d \rangle$ wird über eine große Zahl (typisch sind 100 oder 200) an Programmläufen mit randomisierten Kopplungen ermittelt. Dabei wird auch der Fehler des Mittelwerts bestimmt, der aber in den meisten Fälle kleiner als die dargestellte Punktgröße ist und so in den Abbildungen nicht immer sichtbar ist.

Da keine analytische Formel zur Berechnung der Eigenwerte der $\eta^{(1)}$ - und $\eta^{(2)}$ -Matrizen vorliegt, bleibt hier nur der Vergleich der Pulse untereinander. Zudem wird hier mit den Ergebnissen der Magnusentwicklung verglichen.

Diese Ergebnisse sind in Abbildung 3.33a und (b) für unterschiedliche Kombinationen von α , γ_λ und γ_ω dargestellt.

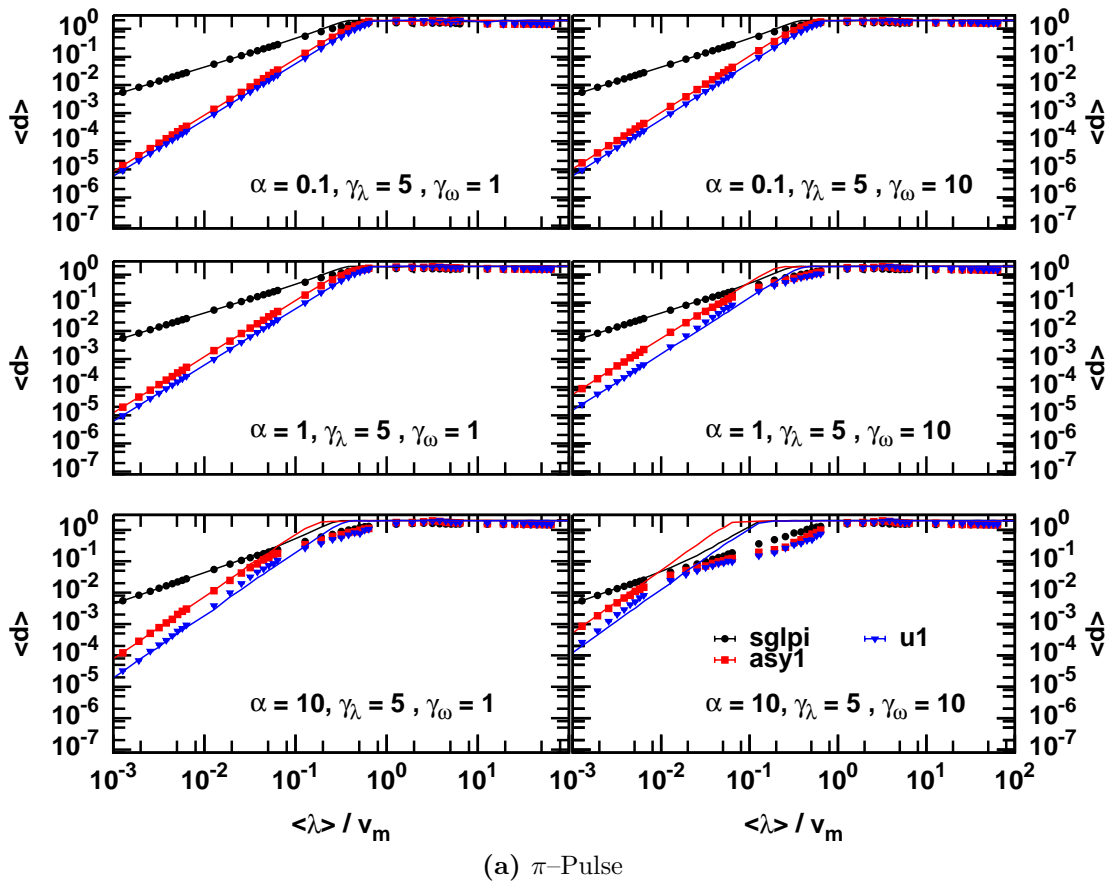


Abbildung 3.33 $\langle d \rangle$ für ein dipolares System der Größe $N = 5$ unter Wirkung unterschiedlicher π -Pulse. λ_i per iPDF; ω_{ij} gewürfelt; benutzt wurde Gleichverteilung. Weitere Erläuterungen siehe nächste Seite.

Wie man in den beiden Abbildungen 3.33a und (b) erkennt, werden die analytischen Erwartungen der Magnusentwicklung voll erfüllt.

Man kann weiterhin auch gut erkennen, dass der Puls A2nd1 – wie erwartet – in Teilbereichen nicht mit der zweiten Ordnung allein beschreibbar ist, sondern schon ein kubisches Verhalten ($\propto \langle \lambda \rangle^3$) aufweist. Dies ist wieder der hohen Optimierungsgüte $\eta_{21} \approx \eta_{22} \approx 0$ und $\eta_{23} = 0.017$ geschuldet.

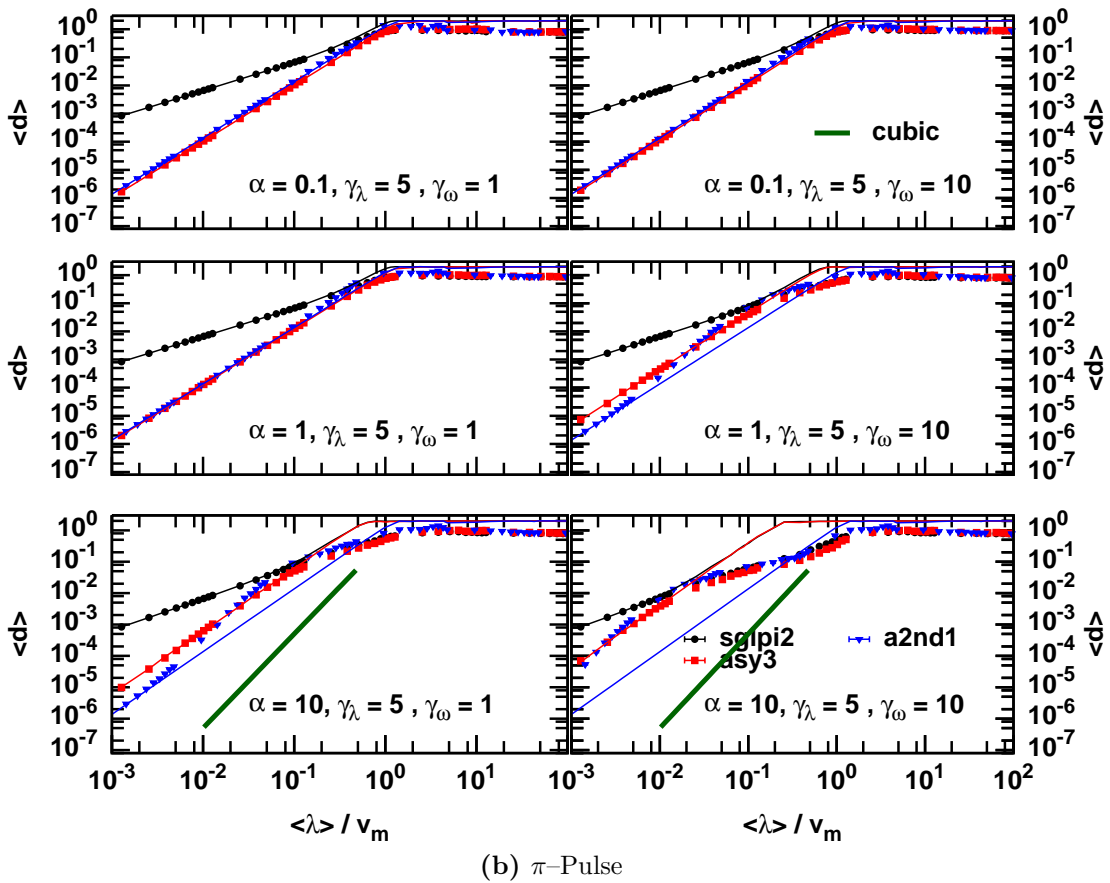


Abbildung 3.33 Darstellung des mittleren Abstandsparameters $\langle d \rangle$ für ein dipolares System der Größe $N = 5$ unter Wirkung unterschiedlicher Pulse. Die λ_i wurden gemäß iPDF generiert. Die ω_{ij} wurden mit Hilfe eines Zufallszahlengenerators jeweils 100 mal gewürfelt. Beide Male wurde eine Gleichverteilung genutzt. Neben den Kurven der Magnusentwicklung gemäß Gleichung (2.1.31) (durchgezogene Linien) wurde in den unteren Graphen eine willkürlich gewählte kubische Funktion ($\langle \lambda \rangle^3$) in dunkelgrün eingezeichnet. Als Skalierung der Kopplungen kam Schema 16 zum Einsatz.

Alle dargestellten Kurven in Abbildung 3.33 zeigen erst ab großen $\gamma_\omega > 10$ sichtbare Abweichungen vom einfachen Potenzverhalten bzw. der Magnusentwicklung bis zur zweiten Ordnung.

Dabei ist festzuhalten, dass trotz aller Abweichungen die optimierten Pulse weiterhin unterhalb der nichtoptimierten Pulse SGLPi und SGLPi2 rangieren, was sie zu aussichtsreichen Kandidaten für experimentelle Anwendungen macht.

Vergleich mit der Potenzreihenentwicklung

Auch in diesem Fall ist es von Interesse, inwieweit die Näherungen Bestand haben, also bis zu welchen Parameterwerten die Kurven durch ein einfaches Potenzverhalten beschreibbar sind.

Wieder wurden für verschiedene Parametersätze α, γ_λ und γ_ω Daten – wie in Abbildung 3.33a und (b) gezeigt – generiert und anschließend mit dem Programm `datafit` (siehe Abschnitt B.3.3) ausgewertet.

Die jeweils gefundene maximale Kopplung λ_m dividiert durch die maximale Feldamplitude v_m wird in den Abbildungen 3.34 dargestellt³⁰.

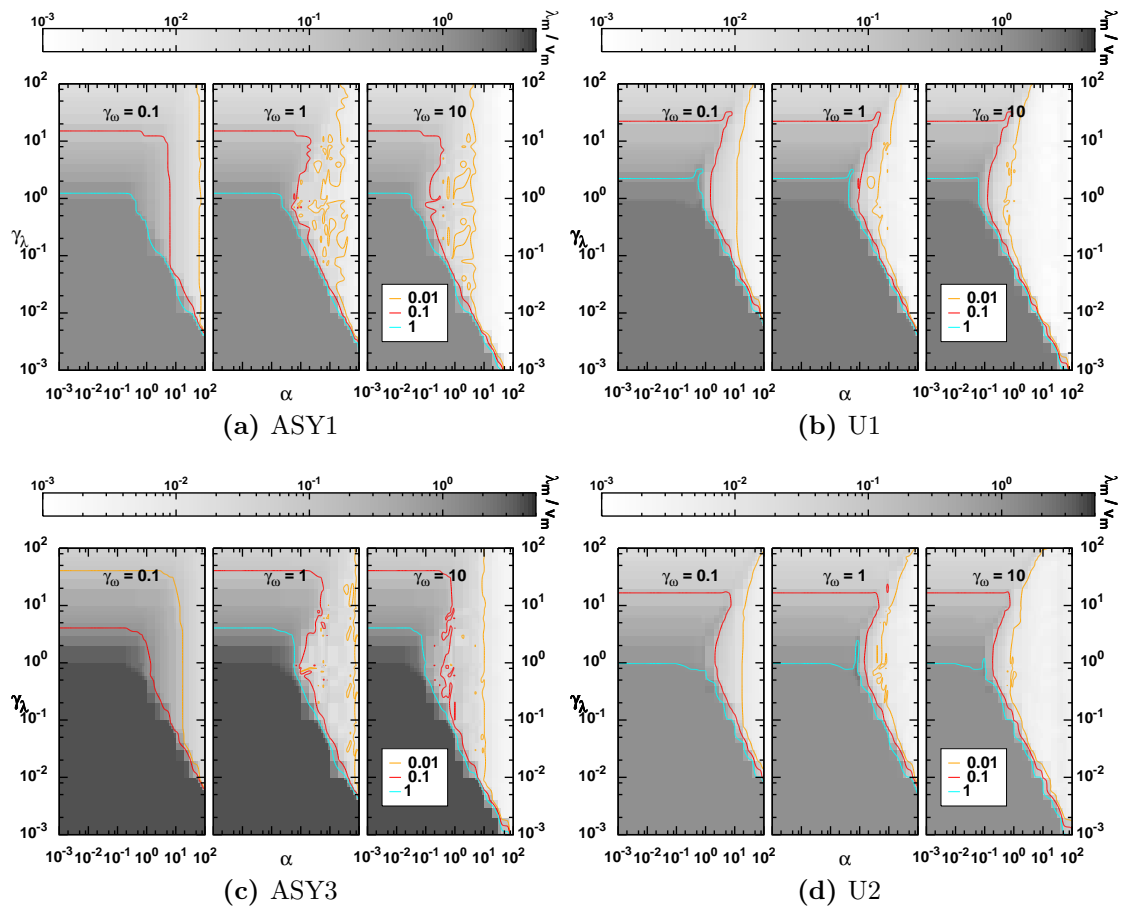


Abbildung 3.34 Darstellung der oberen Fitgrenze λ_m gegen die Kopplungsparameter α und γ_λ aufgetragen, bei unterschiedlicher Streuung der γ_ω der ω_{ij} -Kopplungen. Zusätzlich wurden farbige Höhenlinien eingezeichnet, die dem Leser die Betrachtung erleichtern sollen. Man beachte, dass in c) die Höhenlinien für $\gamma_\omega = 0.1$ fehlerhaft dargestellt werden, dort beschreibt die rote Linie $\lambda_m/v_m = 1.0$ und die orangene Linie $\lambda_m/v_m = 0.1$. Die Daten wurden per iPDF und einer Gleichverteilung in einem System von $N = 5$ Spins generiert, das Skalierungsschema ist 16.

Wie in Abbildung 3.34 gezeigt, erreicht die Übereinstimmung der Potenzreihenentwicklung mit den Daten der vollen Zeitentwicklung (α, γ_λ)-Bereich einen recht hohen Wert von

$$\lambda_m/v_m \leq 1. \quad (3.2.48)$$

Um zu untersuchen, wie genau diese Obergrenze λ_m mit α bzw. γ_λ zusammenhängt, betrachte ich Schnitte durch jeweils einen der Graphen aus 3.34. Dies ist für zwei Werte in Abbildung 3.35 dargestellt.

Man sieht in Abbildung 3.35) für γ_λ einen reziproken Abfall der Übereinstimmung λ_m der vollen Zeitentwicklung verglichen mit der Potenzreihenentwicklung gemäß

³⁰Wie zuvor bezeichnet λ_m den Wert, ab dem der Fehler eines quadratischen Fits $\sqrt{\chi^2}$ einen vorgegebenen Wert überschreitet.

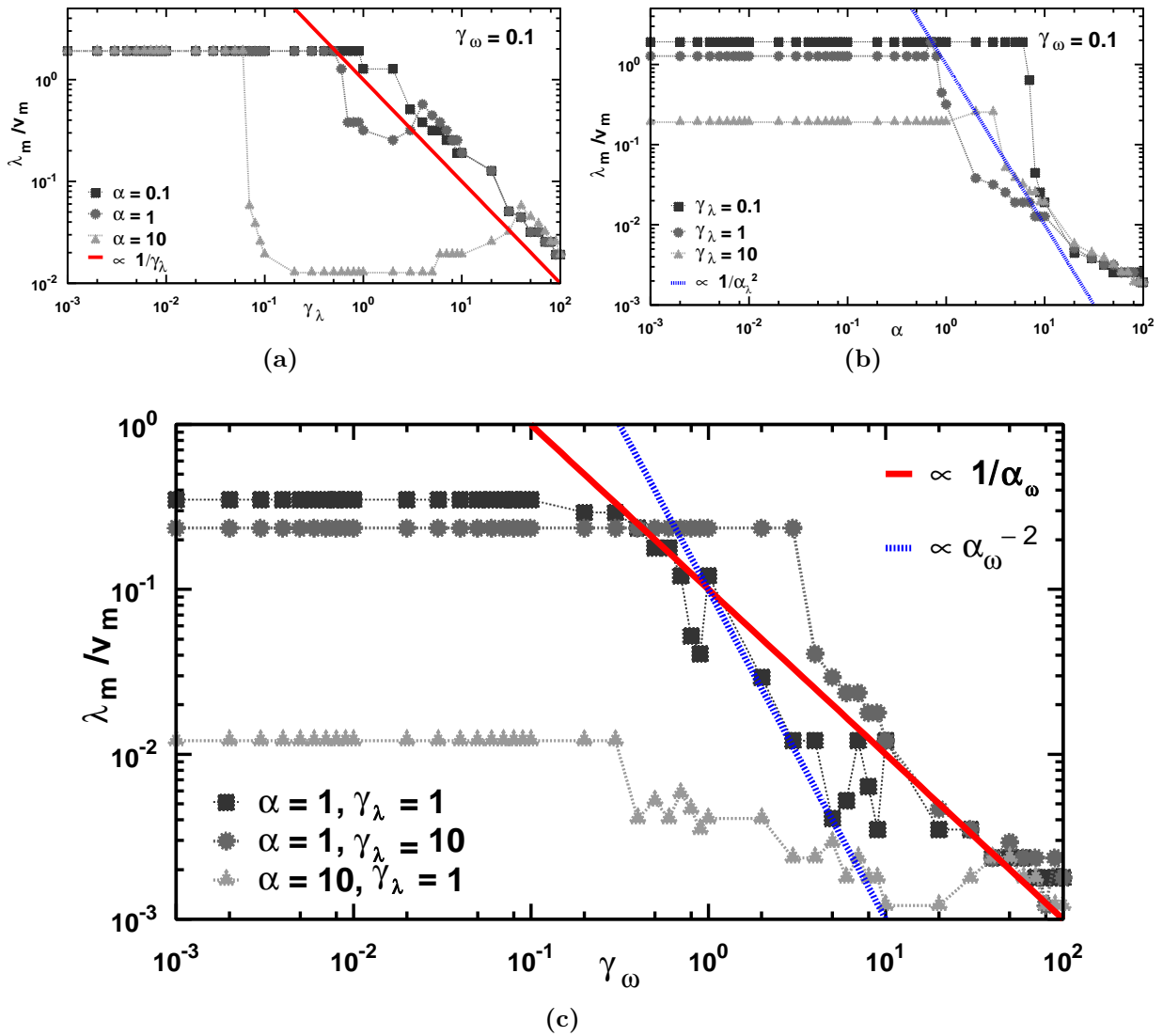


Abbildung 3.35 Schnitte durch Abbildung 3.34b (Puls U1) zur Bestimmung der Skalierung der Grenze λ_m/v_m . Im linken Graphen (a) zeigt sich – wie erwartet – ein lineares Verhalten mit der Kopplungsbreite γ_λ , der rechte Graph (b) zeigt ein quadratisches Verhalten in α . Graph (c) lässt keine eindeutige Aussage zu, auch wenn der lineare Abfall am wahrscheinlichsten scheint.

$$\lambda_m/v_m \propto 1/\gamma_\lambda \tag{3.2.49a}$$

hinsichtlich γ_λ . Für α ergibt sich

$$\lambda_m/v_m \propto 1/\alpha^2 . \tag{3.2.49b}$$

Beide Male jedoch erkennt man ein ausgeprägtes Plateau, das wir bereits in Abbildung 3.27 kennengelernt haben. Wie dort angesprochen, ist dieses Plateau der Tatsache geschuldet, dass ab unterhalb einer gewissen Grenze in γ_λ oder γ_ω die Wahrscheinlichkeitsdichten zur Erzeugung der λ_i bzw. der ω_{ij} so scharf fokussiert sind, dass effektiv keine Variation der Kopplungswerte selbst stattfindet.

Auch hinsichtlich γ_ω zeigt sich das Plateauverhalten. Der folgende Abfall bei $\gamma_\omega \gtrsim 0.5$ ist aber nicht eindeutig zu quantifizieren. So sind sowohl linearer als quadratischer Abfall in γ_ω möglich.

Da allerdings für größere α bzw. γ_λ ein sichtbar lineares Verhalten erkennbar ist, sollte dies die dominante Ordnung repräsentieren

$$\lambda_m/v_m \propto 1/\gamma_\omega . \quad (3.2.49c)$$

Die anderen Pulse der zweiten Ordnung zeigen ein ähnliches Verhalten. Die Pulse, die auch teilweise die zweite Ordnung optimieren (wie z.B. A2nd1), sind entzogen dieser Analyse, da sie – wie z.B. in Abbildung 3.33 gezeigt – nicht allein durch die zweite Ordnung der Potenzreihenentwicklung beschrieben werden.

In nächster Schritt in der Prüfung der Potenzreihenentwicklung und darüber hinaus der Magnusentwicklung sollte darin bestehen, das empirisch gefundene Verhalten (Gleichungen (3.2.49a) bis (3.2.49c)) einerseits quantitativ und analytisch zu untersuchen und mit den analogen Resultaten der Magnusentwicklung zu vergleichen.

3.2.7. Analyse des dipolaren Modells II

Dieser Abschnitt widmet sich der Untersuchung der „neuen“ Pulse, die in Kapitel 2.2.2 vorgestellt wurden, im Kontext des dipolaren Modells aus Kapitel 3.2.5. Diese Analyse baut dabei sinnvollerweise auf den Verfahren des vorangegangenen Kapitels 3.2.6, das die „alten“ Pulse aus Abschnitt 2.1.1 betrachtete, auf.

Zur Erinnerung sei nochmals darauf hingewiesen, dass diese Pulse dazu dienen, das Qubit vom Bad zu entkoppeln. Das heißt, dass die Zeitentwicklung unter Wirkung des realen Pulses $U_p(\tau_p, 0)$ idealerweise als vertauschbares Produkt des Pulsoperators P_θ und der freien Entwicklung der Badspins $e^{-i\tau_p \mathcal{H}_b}$ dargestellt werden kann, d.h. dass die Zielsetzung

$$U_{ip}(\tau_p, 0) = e^{-i\tau_p \mathcal{H}_b} \hat{P}_\theta , \quad (2.2.1)$$

verfolgt wird. Die Abweichung dieses Ideals von der tatsächlichen Zeitentwicklung des Systems U_{rp} wird wieder durch das Abstandsmaß d

$$d = \sqrt{\max(\text{EigenValue}[\Delta\Delta^\dagger])} \quad (3.1.7)$$

gemessen (siehe Kapitel 3.1).

Anders als in Abschnitt 2.1.4 gelang es mit den „neuen“ Pulsen (siehe Kapitel 2.2.2) auch Pulse derart zu optimieren, dass wir – wie bereits in Abschnitt 3.2.3 gezeigt – für manche Pulse ein ausgeprägtes Potenzverhalten $d \propto \lambda^3$ erwarten dürfen.

Da sich die analytischen Formeln der Magnusentwicklung der „neuen“ Pulse im Rahmen des dipolaren Modells (Gleichung (3.2.20)) letztendlich nur in den Werten der Entwicklungskoeffizienten η_{ij} (Gleichungen 2.2.42) von denen der „alten“ Pulse unterscheiden, kann hier auf eine erneute Untersuchung des Skalierungsverhaltens bzgl. der Badgröße n verzichtet werden.

Die zuvor identifizierten Skalierungsfaktoren finden daher auch hier Anwendung, d.h.

$$\text{Scaling 16} = \begin{cases} \lambda_i \rightarrow \lambda_i/n \\ \omega_{ij} \rightarrow \omega_{ij}/\sqrt{n} \end{cases} . \quad (3.2.50)$$

Dass diese Faktoren – insbesondere hinsichtlich ω_{ij} – die Abhängigkeit der Systemgröße $N = n + 1$ nicht vollständig aufheben, muss dabei beachtet werden.

Auch ist eine ausführliche Vorstellung aller Varianten der Kopplungswahl ($\lambda_i = \lambda \forall i$, randomisiert, iPDF und $\omega_{ij} = 0, = \omega \forall (i, j)$, randomisiert) nicht zwingend erforderlich.

Hier beschränke ich mich – selbstverständlich nach Prüfung der anderen Varianten – auf die Vorstellung der Fälle $\lambda_i \Rightarrow$ iPDF und $\omega_{ij} \Rightarrow$ RND.

Die durchgeführten – aber hier nicht vorgestellten – Ergebnisse der verbliebenen Varianten verhalten sich analog zu den Resultaten aus Abschnitt 3.2.6 und liefern somit keine wesentlichen neuen Informationen.

Es zeigt sich, dass die Ergebnisse, den theoretischen Erwartungen der Magnus- und Potenzreihenentwicklung aus Kapitel 2.2 – wie zuvor – im Kern entsprechen.

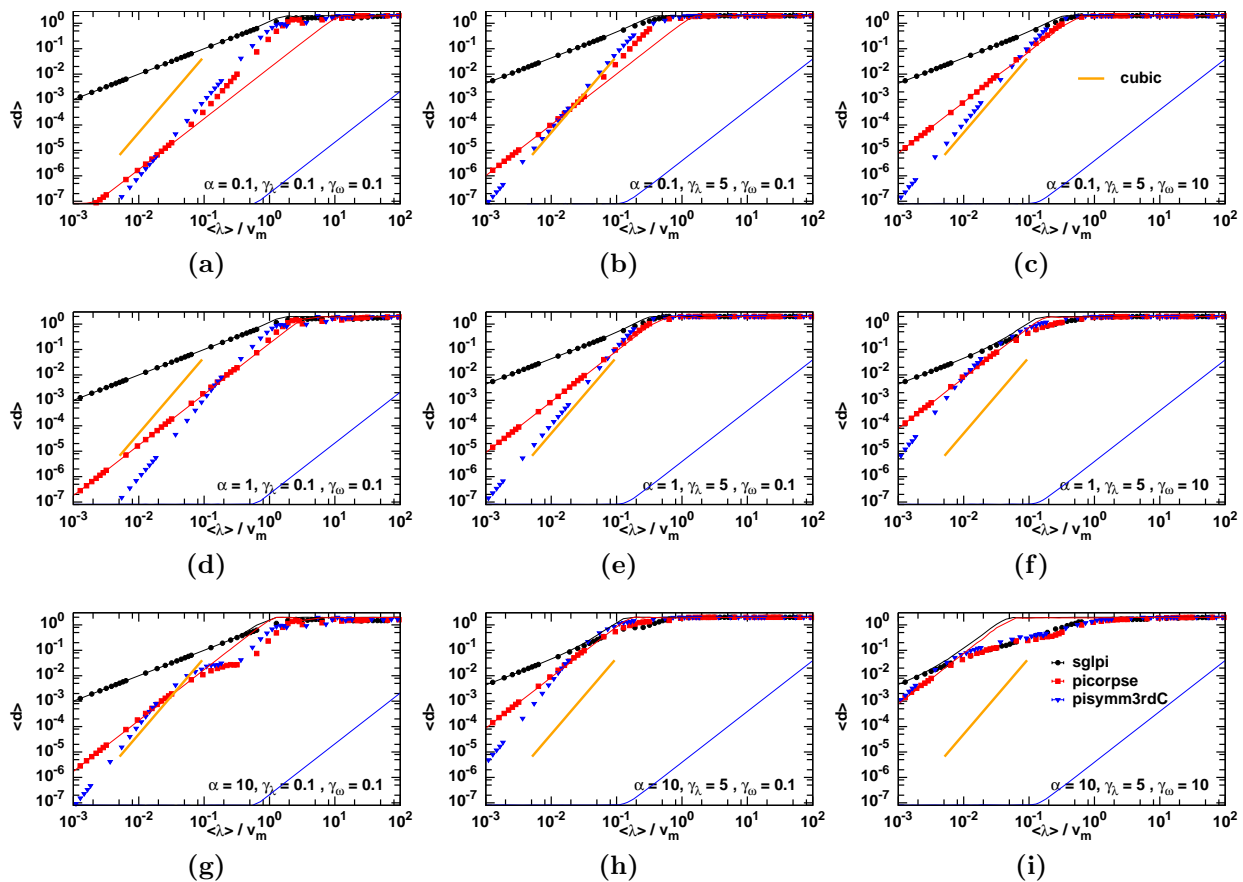


Abbildung 3.36 Vergleich dreier π -Pulse aus Abschnitt 2.2.2 bei verschiedenen Systemparametern (Badkopplung: α , Streuung der λ_i : γ_λ , Streuung der ω_{ij} : γ_ω). Weitere Erläuterungen auf der nächsten Seite

Vergleich der Pulse

Ein Vergleich jeweils dreier π bzw. $\pi/2$ -Pulse ist in den Abbildungen 3.36 und 3.37 gegeben.

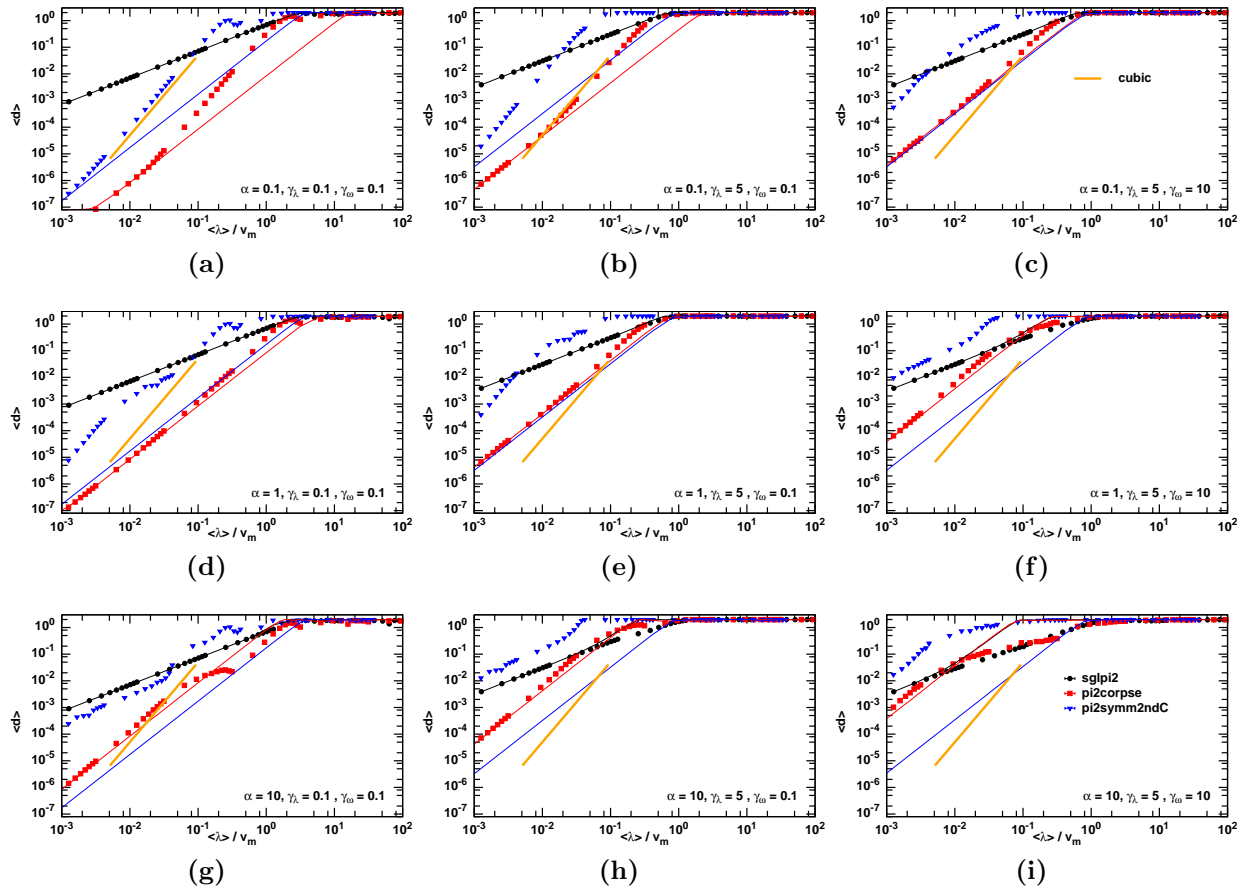


Abbildung 3.37 Vergleich dreier $\pi/2$ -Pulse aus Abschnitt 2.2.2. Die Punkte geben die Ergebnisse der vollen Zeitentwicklung, die korrespondierenden durchgezogenen Linien die der Magnusentwicklung der zweiten Ordnung gemäß (2.2.33) an. Zur visuellen Unterstützung wurde auch eine Kurve dritter Ordnung $d \propto \lambda^3$ (orangefarbene Linie) eingezeichnet. Die Wahl der λ_i geschah per iPDF, die der ω_{ij} randomisiert. Das Skalierungsschema 16 kam zur Anwendung. Die Systemgröße beträgt $N = 5$.

Dabei fallen unter anderem die Abweichungen der Pulse PiCorpse und PI2Corpse hinsichtlich der vollen Zeitentwicklung von der Magnusentwicklung bei kleinen α und γ_λ (Abbildungen 3.37a bis (c) und 3.36a bis (c)) ins Auge.

Dies liegt darin begründet, dass bei kleinen α die Baddynamik (d.h. die ω_{ij}) kaum eine Rolle spielt, also der Kommutator $[\mathcal{H}_b, A]$ insgesamt nur wenig beiträgt und somit der Anteil $\eta_{23}\sigma_y A^2$ der zweiten Ordnung $\eta^{(2)}$ dominiert. Für die angesprochenen Pulse betragen $\eta_{23} = -0.0017$ (PiCorpse) bzw. $\eta_{23} = -0.0005$ (Pi2Corpse).

Diese recht kleinen Werte η_{23} führen im Bereich $\langle \lambda \rangle \gtrsim 0.1$ dazu, dass die – analytisch unbekannt – dritte Ordnung $\eta^{(3)}$ gegenüber der zweiten $\eta^{(2)}$ dominiert. Diese Eigenschaft erklärt die angesprochenen Abweichungen. Lediglich bei sehr kleinen $\langle \lambda \rangle \lesssim 5 \times 10^{-2}$ beschreibt die zweite Ordnung die Abweichung zum Idealpuls adäquat.

Die Abweichungen der Pulse Pi2Symm2ndC und PiSymm3rdC (blaue Linien und Punkte in Abbildung 3.36 und 3.37) hingegen sind Ausdruck der erfolgreichen Optimierung dieser Pulse.

In beiden Fällen gelang es, die zweite Ordnung – im Rahmen der numerischen Genauigkeit – vollständig zu optimieren, d.h. $\eta_{2j} < 1 \times 10^{-6} \forall j = 1 \dots 3$. Den Erfolg dieser Optimierung erkennt man in Abbildung 3.36 und 3.37 daran, dass diese Pulse in weiten Teilen ein kubisches Verhalten bezüglich $\langle \lambda \rangle$ aufweisen³¹. Die Kurve (durchgezogene blaue Linie) der Magnusentwicklung der zweiten Ordnung liefert gänzlich unpassende Ergebnisse und dient nur der Bestätigung des angesprochenen Verhaltens.

Obwohl die optimierten Pulse das erwartete Verhalten zeigen, stellen sie aber nicht immer die beste Wahl dar.

Besonders deutlich erkennt man in Abbildung 3.37 für Pi2Symm2ndC, dass dieser in weiten Teilbereichen ein schlechteres Abstandsmaß d liefert, als der teiloptimierte Puls Pi2Corpse – der lediglich die erste Ordnung korrigiert – und teilweise sogar unterhalb des simplen Pulses SGLPi rangiert. Dieses Verhalten findet sich auch bei anderen betrachteten Pulsen (wenngleich in schwächerer Form) wieder.

Dieses Verhalten, das auch bereits in anderen Kapiteln angesprochen wurde³², ist Ausdruck der einfachen Tatsache, dass sowohl die Vorfaktoren einer Potenzfunktion $d = \eta_x \lambda^x$ als auch der Exponent x letztendlich darüber entscheiden, in welchem Bereich der $\langle \lambda \rangle$ der Wertebereich d einer Funktion unterhalb dessen einer anderen Funktion liegt³³.

Diese Information darf aber lediglich dazu führen, dass die Wahl der Pulse in einem konkreten Experiment den herrschenden Rahmenbedingungen hinsichtlich Kopplungskonstanten, Pulsstärken und Pulsdauern angepasst werden muss. Eine grundsätzliche Ablehnung oder Bevorzugung der optimierten Pulse kann und darf aus dieser simplen Erkenntnis nicht abgeleitet werden.

Gültigkeit der Potenzreihenentwicklung

Wie zuvor, erfolgt auch hier eine Analyse der Gültigkeit der Potenzreihenentwicklung. Dazu wurden für unterschiedliche Parameter α , γ_λ und γ_ω Daten wie in Abbildung 3.36 generiert und anschließend mit dem Programm `datafit` (siehe Anhang B.3.3) ausgewertet.

Es wird eine (quadratische) Funktion an die Daten angepasst. Dabei werden die obere Grenze ³⁴ λ_m des Fitbereichs dynamisch bestimmt, so dass die tatsächliche quadratische Abweichung $\sqrt{\chi^2}$ des Fits unterhalb einer vorgegebenen Grenze von 1×10^{-2} liegt. Der Exponent des Fits wurde dabei mit 2 vorgegeben und festgehalten, d.h. $f(\lambda) = a\lambda^2$.

³¹Dazu vergleiche man den Kurvenverlauf der Pulsdaten mit der der orangefarbenen Hilfskurve $\propto \langle \lambda \rangle^3$.

³²Wenngleich es in Kapitel 3.2.6 nicht so ausgeprägt war.

³³Diese Betrachtung gilt streng genommen nur im Gültigkeitsbereich der Potenzreihenentwicklung, reicht aber zur Erklärung des Sachverhalts aus.

³⁴Die untere Grenze kann ebenfalls dynamisch angepasst werden, es wird hier aber meist davon ausgegangen, dass

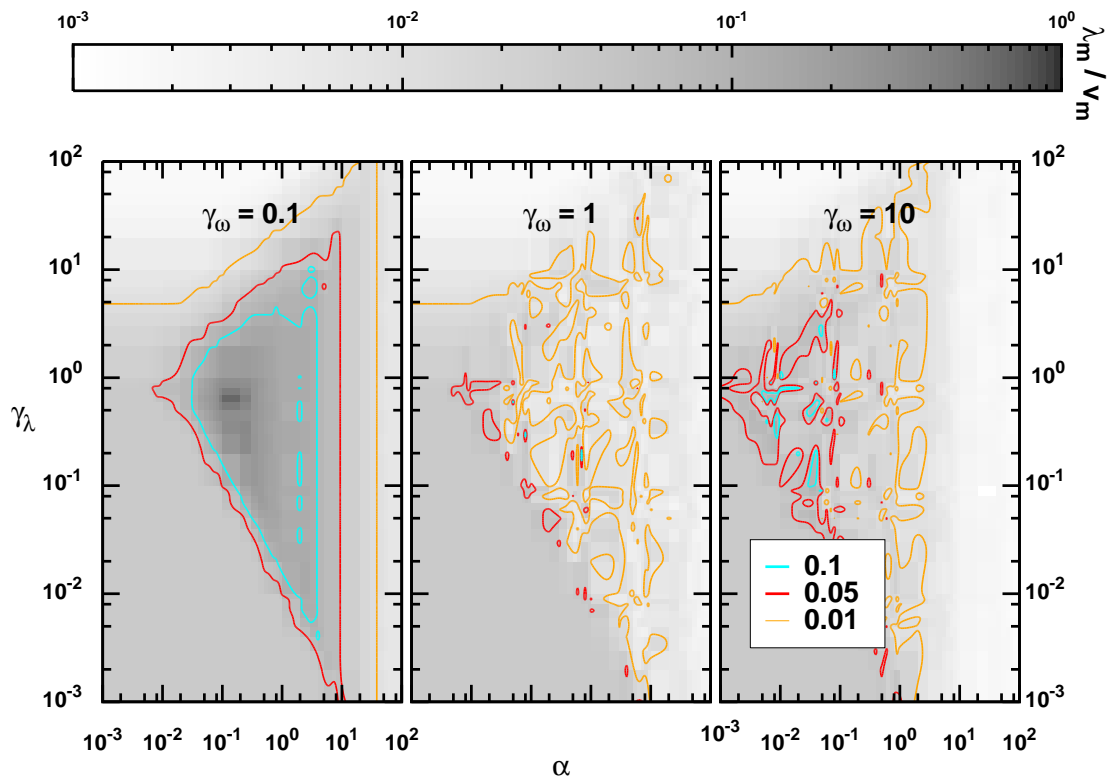


Abbildung 3.38 Darstellung der oberen Grenze λ_m eines quadratischen Fits an Daten wie aus Abbildung 3.36 dividiert durch die maximale Pulsamplitude $v_m = 13/6\pi\tau_p$ des Pulses PiCorpse. Die Daten wurden in einem System von $N = 5$ Spins mit λ_i Kopplungen gemäß iPDF und zufällig erzeugten ω_{ij} für eine Gleichverteilung generiert. Das Skalierungsschema ist 16.

Für PiCorpse sind die erzielten Ergebnisse in Abbildung 3.38 gezeigt. Dort erkennt man deutlich, dass der Puls PiCorpse teilweise das Verhalten eines Pulses dritter Ordnung aufweist, was durch die geringe Größe des Koeffizienten $\eta_{23} = -0.00174$ erklärt werden kann.

Anders als Abbildung 3.34, in der einige „alte“ Pulse analog betrachtet wurden, tritt daher bei $\alpha \lesssim 1$ und $\gamma_\lambda \lesssim 1$ kein einfaches Plateau^a dem ein „Gefälle“ folgt auf, sondern man erkennt eine „Hügel“-artige Struktur.

^agemeint ist ein konstanter Wert λ_m .

Dieser „Hügel“ bildet sich im mittleren Bereich um ($\alpha \approx 1, \gamma_\lambda \approx 1$) aus und fällt dann für große α bzw. γ_λ wieder ab. Einige beispielhafte Kurven, die als in Schnitte durch Abbildung 3.34 erzeugt wurden, sind in Abbildung 3.39 abgebildet.

Leider ist aber auch anzumerken, dass die Obergrenzen nicht die Werte aus Abbildung 3.34 erreichen. Dennoch sind diese Werte auch immer im Bezug zum Experiment zu sehen, bei dem einerseits die Kopplungsstärken λ_i bzw. ω_{ij} der jeweiligen Proben, zum anderen aber auch comparative Größen wie τ_p und v_m zu berücksichtigen sind.

für $\lambda \rightarrow 0$ das Potenzverhalten in jedem Fall vorliegt.

In jedem Fall zeigen sich große Bereiche, in denen die vorgestellten Pulse den analytischen Erwartungen der Magnus- bzw. der Potenzreihenentwicklung voll entsprechen. In weiten Teilen übertreffen sie auch die simplen Pulse und heben sich deutlich von diesen ab.

Auch die „neuen“ Pulse, beziehungsweise die neue Zielsetzung erfordert eine Analyse der Abweichungen zwischen Magnus- bzw. Potenzreihenentwicklung und den Daten der vollen Zeitentwicklung hinsichtlich der Parameter α , γ_λ und γ_ω . Dies geschieht wieder, in dem „Schnitte“ durch 3.38 untersucht werden. Das Ergebnis ist in Abbildung 3.39 dargestellt.

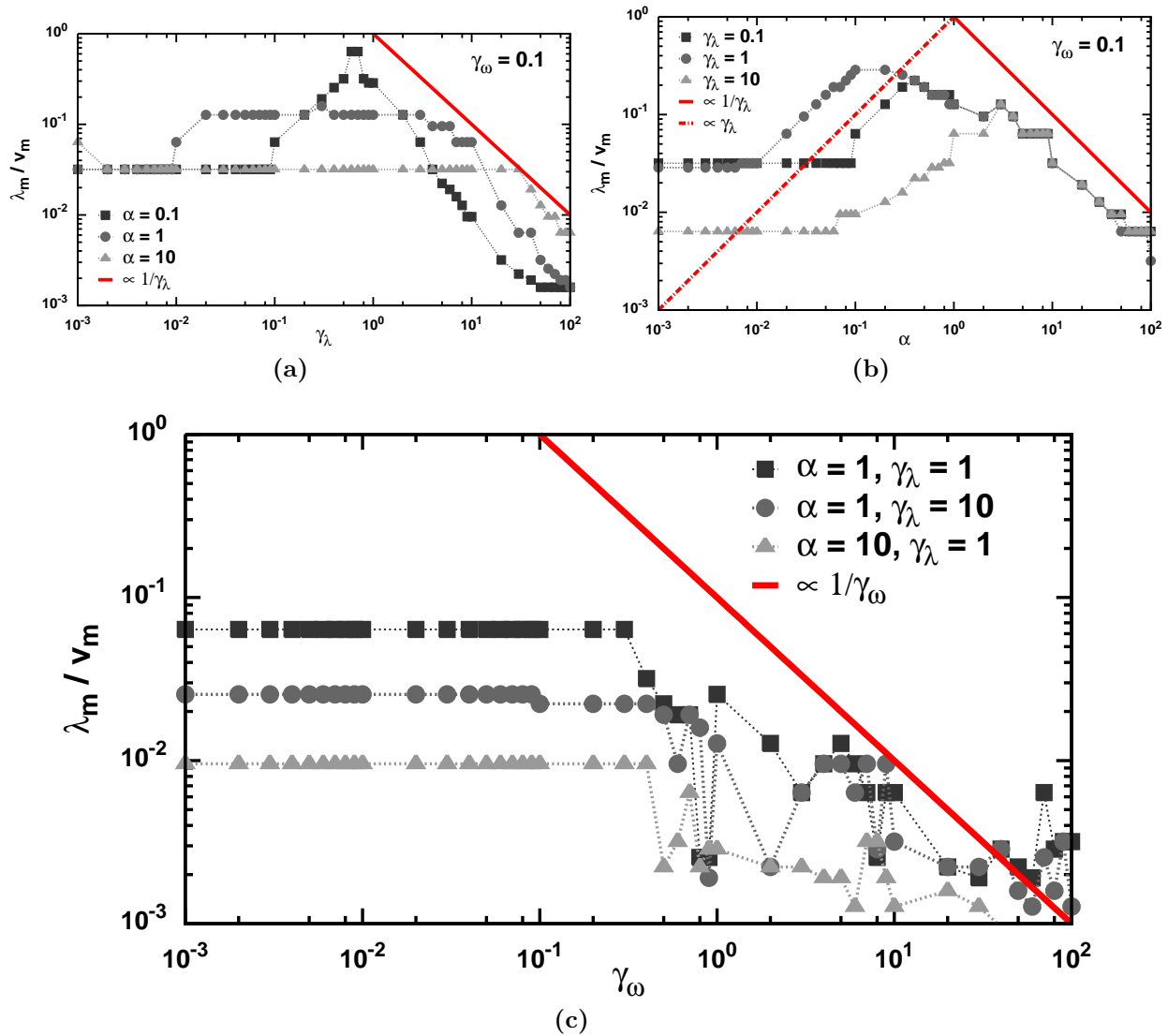


Abbildung 3.39 Schnitte durch Abbildung 3.38 (PiCorpse) zur Bestimmung der oberen Fitgrenze λ_m/v_m . In (a) zeigt sich – wie zuvor – ein lineares Verhalten mit der Kopplung γ_λ . Der rechte obere Graph (b) zeigt abweichend zu Abbildung 3.35 einen linearen Anstieg bzw. Abfall in α . Graph (c) zeigt einen linearen Abfall in γ_ω . Zur Hilfe wurden jeweils Kurven der entsprechenden Potenzgesetze eingezeichnet.

Anders als in Abbildung 3.34 erkennt man in Abbildung 3.39a, dass für PiCorpse kein simples

Plateau für kleine α und kleine γ_λ existiert, dieses Verhalten wurde bereits im Zusammenhang mit Abbildung 3.38 angesprochen.

Dieser „Hügel“ ist auch in Abhängigkeit von α erkennbar (siehe Abbildung 3.39b). Hier fällt die Fitobergrenze λ_m mit $1/\alpha$ ab.

In Abbildung 3.34 wird hier ein quadratischer Abfall offenbar. Gleichzeitig kann man hier einen linearen Anstieg in α für kleine α feststellen. Abbildung (c) zeigt diesmal einen deutlichen linearen Abfall von λ_m/v_m mit der Breite der Verteilung des Badkopplungen γ_ω .

Dieses Verhalten wurde bereits in 3.34 vermutet, war aber nicht so deutlich ausgeprägt wie es hier der Fall ist. Rückwirkend wird so auch die erste Annahme gestärkt.

3.2.8. Fazit zum dipolaren Modell

Auch das dipolare Modell (Seiten 77ff.) weist – ebenso wie das Kettenmodell (Seiten 55ff.) – eine hervorragende Übereinstimmung der Magnus- bzw. der daraus abgeleiteten Potenzreihenentwicklung auf.

Obwohl die Komplexität des Modells die des Kettenmodells übertrifft – sowohl hinsichtlich der Zahl der Kopplungen an das Qubit als auch hinsichtlich ihrer Natur³⁵ – sind die Resultate davon weitgehend unbeeinflusst.

Dies zeugt davon, dass die (fast) modellunabhängigen Rechnungen aus Kapitel 2 einen wertvollen Beitrag sowohl für Experimente, als auch für weitere theoretische Untersuchungen liefern können.

Wie bereits im Kettenmodell konnte auch gezeigt werden, dass die optimierten Pulse in vielen Fällen eine deutliche Verbesserung gegenüber den nichtoptimierten Pulsen SglPi und SglPi2 darstellen. Diese Arbeit zeigt aber auch mögliche Grenzen der optimierten Pulse im Vergleich zu den nichtoptimierten auf.

³⁵Zufällig gewählte bzw. entsprechend angepasste Kopplungen.

4. Fazit und Ausblick

4.1. Zusammenfassung

Im ersten Abschnitt 1 wurde die grundlegende Bedeutung der Quanteninformationsverarbeitung und einiger experimentell relevanter Systeme hervorgehoben. Im folgenden beschränke ich mich auf Systeme/Modelle, die ein einzelnes Qubit – gekoppelt an ein Bad mit Eigendynamik – behandeln.

Das folgende Kapitel 2 stellt zwei wesentliche Publikationen der Arbeitsgruppe (Pasini et al. 2008) und (Pasini et al. 2009) vor, in denen es gelang, für abstrakte Modelle der Gestalt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_b + \lambda A \sigma_z \quad (2.1.1)$$

Gleichungen mit dem Ziel der Entkopplung der zeitlichen Badevolution von der Pulswirkung

$$U_p(\tau_p, 0) = u_p(\tau_p, \tau_s) \hat{P}_\theta u_p(\tau_s, 0) \quad (2.1.9)$$

beziehungsweise die vollständige Entkopplung der Bad- und Qubitevolution

$$U_p(\tau_p, 0) \approx \mathbf{e}^{-i\tau_p \mathcal{H}_b} \hat{P}_\theta \quad (2.2.1)$$

abzuleiten. Die in Abschnitt 3.2.1 gezeigten numerischen Untersuchungen am Kettenmodell dienten dabei beide Male als Bestätigung der analytischen Überlegungen.

Dies gelang in beiden Fällen durch konsequente Lösung der Schrödingergleichung und Anwendung der Magnus-Entwicklung (siehe Anhang A.1.2). Schlussendlich wurden Integralgleichungen der Entwicklungsparameter (η_{ij} , Gleichungen (2.1.40) bzw. (2.2.42)) der Abweichung der Zeitentwicklung vom jeweils vorgegebenen Ziel berechnet, die im weiteren Verlauf durch Wahl geeigneter Pulsparameter (Pulsamplitud(en), Schaltzeitpunkte, Zahl der Schaltprozesse) optimiert wurden.

Einige Resultate dieser Optimierung finden sich – zusammen mit den Entwicklungsparametern – in den Abschnitten 2.1.4 und 2.2.2.

In Abschnitt 3 stelle ich anschließend meine Simulationsergebnisse der vollen Zeitentwicklung im Vergleich mit der approximativen Zeitentwicklung der Magnusentwicklung bzw. der Potenzreihenentwicklung, die der Pulsoptimierung zugrunde lag, vor. Dies geschieht anhand zweier Modelle, einem Kettenmodell

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sigma_z \lambda \sigma_z^{(1)}}_A + \omega \underbrace{\sum_{i=1}^n \bar{\sigma}^{(i)} \cdot \bar{\sigma}^{(i+1)}}_{\mathcal{H}_b} . \quad (3.2.1)$$

und einem Modell mit Dipol-Dipol-Wechselwirkung (dipolares Modell)

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sigma_z \cdot \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_z^{(i)}}_A + \underbrace{\sum_{i < j}^n \omega_{ij} \left(3\sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} - \bar{\sigma}^{(i)} \bar{\sigma}^{(j)} \right)}_{\mathcal{H}_b} . \quad (3.2.20)$$

Beide Male werden sowohl die Pulse der Optimierung gemäß Gleichung (2.1.9) aber auch die gemäß Gleichung (2.2.1) evaluiert.

Das dipolare Modell erweist sich aufgrund seiner expliziten Systemgrößenabhängigkeit sowie der höheren Zahl frei wählbarer Kopplungsparameter im Vergleich zum Kettenmodell anspruchsvoller und dient dazu, die ersten Analysen am Kettenmodell zu bestätigen aber auch dazu mögliche Grenzen der optimierten Pulse und der Magnus-/Potenzreihenentwicklung aufzuweisen.

Dennoch konnten auch hier die analytischen Rechnungen der Magnus-/Potenzreihenentwicklung in einem weiten Parameterbereich¹ verifiziert werden.

In den meisten Fällen konnte gezeigt werden, dass die Anwendung der optimierten Pulse eine deutliche Verbesserung gegenüber nicht-optimierten (SglPi und SglPi2) oder bereits bekannten Pulsen (z.B. Corpse) darstellt. Eine naive Anwendung der optimierten Pulse, die davon ausgeht, dass diese immer die beste Wahl darstellen, ist jedoch nicht zulässig.

Da in dieser Arbeit auch dargestellt wird, in welchen Bereichen, diese optimierten Pulse gegenüber den klassischen Pulsen keine Verbesserung bzw. eine Verschlechterung darstellen, kann sie unter anderem die Planung eines Experiments wesentlich unterstützen.

Für kleine Kopplungen und kleine Verteilungsbreiten^a stellen die optimierten Pulse jedoch immer eine Verbesserung dar.

^aDer Parameter α ist dabei meist nebensächlich (siehe z.B. Abbildung 3.37).

4.2. Ausblick

Obwohl diese Arbeit theoretischer Natur ist, so hat sie doch einen klaren Anwendungsbezug. Kurz nach Veröffentlichung unserer Resultate gelang es Dr. Gonzalo Augustín Álvarez am Lehrstuhl „Experimentelle Physik III“ der TU Dortmund experimentelle Belege der erfolgreichen Optimierung zu liefern. Seine Messungen nahm er dabei an Alanine (vergleiche Abbildung 3.3a) vor. Da diese Befunde bislang nicht publiziert wurden, dürfen hier leider keine Details besprochen werden. Wir hoffen aber, dass diese vielversprechenden Ergebnisse bald der Öffentlichkeit zur Verfügung stehen werden und auch andere (experimentelle) Gruppen animieren, hier weitere Untersuchungen vorzunehmen.

Darüber hinaus ist die Nutzung derartiger Pulse auch im Rahmen der Verwendung von Pulssequenzen von großem Interesse. Obwohl optimierte Pulse in ihrer Struktur einer Pulssequenz sehr ähnlich sind, kann die Verwendung eines solchen innerhalb einer Pulssequenz große Vorteile bieten. Dies wird unter anderem in der Veröffentlichung (Pasini, S. et al. 2011) untersucht und ist auch weiterhin aktueller Forschungsgegenstand.

An einigen Stellen der Arbeit wurde auch angemerkt, dass zukünftig eingehendere Analysen einzelner Aspekte, z.B. des Verhaltens bei logarithmisch-abfallenden Verteilungsfunktionen, gegebenenfalls neue Erkenntnisse für konkrete Experimente liefern können und daher in Betracht gezogen werden sollten. Dazu gehört sicherlich auch der Versuch, deutlich größere Systeme als die hier gezeigten ($N \gg 10$) anzugehen. Dies ist aber mit den hier vorgestellten Methoden nicht ohne weiteres möglich.

Es sollte auch versucht werden, unsere Ergebnisse auf Zwei- oder Multiqubitsysteme zu erweitern, um einen weiteren – großen – Schritt in Richtung Quantencomputing voranzuschreiten.

¹Gemeint sind unter anderem Kopplungskonstanten und Pulsdauern.

A. Mathematischer Anhang

A.1. Magnus-Entwicklung

A.1.1. Zeitordnung

Die formale Lösung zeitabhängiger Probleme der Quantenmechanik ist Gegenstand vieler Lehrbücher. In diesem Abschnitt folge ich der Darstellung von (Slichter 1992, Appendix J und K).

Die zeitliche Entwicklung einer Wellenfunktion ψ ist für einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator relativ einfach anzugeben. Allgemein lautet die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H} \psi . \quad (\text{A.1.1})$$

Im Falle eines **zeitunabhängigen** Hamiltonoperators \mathcal{H} ergibt sich die Zeitentwicklung von ψ als

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t\right) \psi(0) . \quad (\text{A.1.2})$$

In dieser Arbeit werden aber meist **zeitabhängige** Hamiltonoperatoren betrachtet. Im Falle stückweise konstanter Pulse, also solchen, die jeweils für ein Intervall t_i ($i = 1 \dots n$) konstant \mathcal{H}_i sind und dann **instantan** geschaltet werden, ergibt sich als Zeitentwicklung

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_n t_n\right) \dots \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_2 t_2\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_1 t_1\right) \psi(0) . \quad (\text{A.1.3})$$

Im Falle kommutierender Hamiltonoperatoren

$$[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] = 0 \quad (\text{A.1.4})$$

kann man die einzelnen Exponentialfunktionen zu einer gemeinsamen zusammenfassen, entweder als

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_k \mathcal{H}_k t_k\right) \psi(0) \quad (\text{A.1.5a})$$

oder auch als

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{H}(t') dt'\right) \psi(0) . \quad (\text{A.1.5b})$$

Der letzte Ausdruck bedingt bei stückweise konstanten Pulsen die Verwendung entsprechender Heavisidefunktionen (Stufenfunktionen), die den jeweiligen Hamiltonoperator \mathcal{H}_i auf das richtige Zeitintervall t_i beschränken.

In den meisten hier betrachteten Fälle vertauschen die Hamiltonoperatoren **nicht**, das heißt

$$[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] \neq 0 . \quad (\text{A.1.6})$$

Um sich auch in diesem Fall einer kompakten Schreibweise bedienen zu können, bedient man sich des Zeitordnungsoperators \mathcal{T} , dessen Aufgabe darin besteht, die zeitlich richtige Abfolge der einzelnen Bestandteile zu gewährleisten. Dieser wurde erstmals von Dyson (1949) zu diesem Zweck eingeführt. Ein Beispiel:

$$\mathcal{T} \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_1 t_1 \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_3 t_3 \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_2 t_2 \right) \right] = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_3 t_3 \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_2 t_2 \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_1 t_1 \right) . \quad (\text{A.1.7})$$

Auf diese Weise ist es möglich, Gleichung (A.1.3) als

$$\psi(t) = \mathcal{T} \prod_k \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_k t_k \right) \psi(0) \quad (\text{A.1.8})$$

zu schreiben. Darüber hinaus gelingt es

$$\mathcal{T} \prod_k \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_k t_k \right) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \sum_k \mathcal{H}_k t_k \right) \quad (\text{A.1.9})$$

zu formulieren. Der Beweis erfolgt über die Reihendarstellung der rechten und linken Seite.

Betrachtet man die Operatoren A_1 und A_2 , wobei A_1 zur früheren Zeit t_1 und A_2 zur späteren Zeit t_2 wirkt, so ist zu zeigen, dass

$$\mathbf{e}^{A_2} \mathbf{e}^{A_1} = \mathcal{T} \mathbf{e}^{A_2 + A_1} \quad (\text{A.1.10a})$$

gilt. Die Reihendarstellung der linken Seite ergibt

$$\mathbf{e}^{A_2 \tau} \mathbf{e}^{A_1 \tau} = \left(\sum_l \frac{1}{l!} A_2^l \tau^l \right) \left(\sum_m \frac{1}{m!} A_1^m \tau^m \right) \quad (\text{A.1.10b})$$

$$= \sum_n \left(\sum_{k=0}^n \frac{1}{(n-k)! k!} A_2^{n-k} A_1^k \right) \tau^n . \quad (\text{A.1.10c})$$

Die der rechten Seite liefert

$$\mathcal{T} \mathbf{e}^{(A_2 + A_1) \tau} = \mathcal{T} \sum_n \frac{(A_2 + A_1)^n}{n!} \tau^n . \quad (\text{A.1.10d})$$

Nun vergleicht man die Koeffizienten der τ^n . Den Koeffizienten der rechten Seite formt man zu

$$\mathcal{T} (A_2 + A_1)^n = \mathcal{T} [A_2^n + A_2^{n-1} A_1 + A_2^{n-2} A_1 A_2 + A_2^{n-3} A_1 A_2^2 \dots A_2 A_1 A_2^{n-1} + A_1 + A_2^{n-1} \quad (\text{A.1.10e})$$

$$+ \text{Terme mit zwei } A_1 + \text{ usw.}] \quad (\text{A.1.10f})$$

um. Führt man die Zeitordnung aus, so ergibt sich

$$= A_2^n + n A_2^{n-1} A_1 + \frac{n(n-1)}{2} A_2^{n-2} A_1^2 + \dots . \quad (\text{A.1.10g})$$

Zusammenfassend ergibt sich

$$\frac{1}{n!} \mathcal{T} (A_2 + A_1)^n = \sum_{k=0}^n \frac{1}{(n-k)! k!} A_2^{n-k} A_1^k , \quad (\text{A.1.10h})$$

was der gesuchten linken Seite entspricht. Somit ist das Gleichung (A.1.9) gezeigt und wir können die Wellenfunktion in diskreten Zeitintervallen als

$$\psi(t) = \mathcal{T} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_k \mathcal{H}_k t_k\right) \psi(0) \quad (\text{A.1.11a})$$

oder im infinitesimalen Fall als

$$\psi(t) = \mathcal{T} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{H}(t') dt'\right) \psi(0) \quad (\text{A.1.11b})$$

schreiben.

A.1.2. Die Magnus-Entwicklung

Die Magnus-Entwicklung stellt eine Methode dar, Gleichungen wie (A.1.11) perturbativ im Sinne der „Average-Hamiltonian“-Theorie auszuwerten. In der ursprünglichen Arbeit (Magnus 1954) berechnete Magnus die ersten Terme der Entwicklung.

Seitdem ist die Magnus-Entwicklung Gegenstand vieler Veröffentlichungen und findet in diversen Lehrbüchern ¹ Erwähnung. Eine etwas neuere Übersicht über Zusammenhang der Magnus-Entwicklung mit anderen Verfahren zur Berechnung höherer Ordnungen und allgemeinen Aussagen zu Konvergenzverhalten bietet der Artikel (Oteo & Ros 2000) und die darin zitierten Referenzen.

Wie bereits in A.1.1 folge ich auch hier der Argumentationskette aus (Slichter 1992).

In einem ersten Versuch berechnet man die Zeitentwicklung, indem man die Zeitordnung quasi „ignoriert“ und den zeitabhängigen Hamiltonoperator $\mathcal{H}(t)$ durch seinen zeitlichen Mittelwert

$$\bar{\mathcal{H}} = \mathcal{H}^{(1)} = \frac{1}{t} \int_0^t \mathcal{H}(t_1) dt_1 \quad (\text{A.1.12})$$

ersetzt. Das bedeutet für den zeitlichen Propagator

$$U(t) = \mathcal{T} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{H}(t') dt'\right) \quad (\text{A.1.13a})$$

$$\approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \bar{\mathcal{H}} t\right). \quad (\text{A.1.13b})$$

Mathematisch korrekt formuliert, entwickelt man die Exponentialfunktion, wertet die Zeitordnung aus und sortiert die Terme anschließend nach Potenzen von Energie×Zeit. Dabei beschränkt man sich auf Terme linearer Ordnung.

Dieses Vorgehen ignoriert aber, dass die zugrundeliegenden Hamiltonoperatoren im Allgemeinen nicht miteinander vertauschen. Zur besseren Beschreibung muss man also höhere Ordnungen der Entwicklung berücksichtigen, d.h.

$$U(t) \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (\bar{\mathcal{H}} + \mathcal{H}^{(2)} + \mathcal{H}^{(3)} + \dots)t\right). \quad (\text{A.1.14})$$

¹Wie z.B. (Slichter 1992) oder (Ernst et al. 2004)

Die ersten Ordnungen lauten

$$\mathcal{H}^{(2)} = -\frac{i}{2t\hbar} \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 [\mathcal{H}(t_2), \mathcal{H}(t_1)] \quad (\text{A.1.15a})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(3)} = & \frac{1}{6t\hbar^2} \int_0^t dt_3 \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 ([\mathcal{H}(t_3), [\mathcal{H}(t_2), \mathcal{H}(t_1)]] \\ & + [\mathcal{H}(t_1), [\mathcal{H}(t_2), \mathcal{H}(t_3)]]) \end{aligned} \quad (\text{A.1.15b})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(4)} = & \frac{i}{12t\hbar^3} \int_0^t dt_4 \int_0^{t_4} dt_3 \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 ([[[\mathcal{H}(t_2), \mathcal{H}(t_3)], \mathcal{H}(t_1)], \mathcal{H}(t_4)] \\ & + [[[\mathcal{H}(t_2), \mathcal{H}(t_1)], \mathcal{H}(t_3)], \mathcal{H}(t_4)] \\ & + [[[\mathcal{H}(t_4), \mathcal{H}(t_3)], \mathcal{H}(t_2)], \mathcal{H}(t_1)] \\ & + [[[\mathcal{H}(t_1), \mathcal{H}(t_4)], \mathcal{H}(t_2)], \mathcal{H}(t_3)]) . \end{aligned} \quad (\text{A.1.15c})$$

Die höheren Ordnungen sind nur bedingt in einer simplen geschlossenen Form anzugeben. Viele Publikationen wie z.B. (Blanes et al. 2009) führen daher einen **iterativen** Generator der Magnusentwicklung an, der sich aus dem Vergleich der Magnusentwicklung mit der Dysonentwicklung ergibt. Dabei spielt der Vergleich von Matrixexponentialen der Form $e^X e^Y$ mit $e^{\Sigma \dots}$ eine entscheidende Rolle. Konkret kann man dies über

$$e^X e^Y = \exp \left[X + Y + \frac{1}{2} [X, Y] + \frac{1}{12} [X, [X, Y]] + \frac{1}{12} [Y, [Y, Y]] + \dots \right] \quad (\text{A.1.16})$$

veranschaulichen.

Da die konkrete Form höherer Ordnungen für die vorliegende Arbeit nicht relevant ist, verweise ich hier nur auf die entsprechende Literatur (Klarsfeld & Oteo 1989), (Blanes et al. 2009), (**Blanes et al. 2010**) oder (Wilcox 1967). Letztgenannte Veröffentlichung befasst sich hauptsächlich mit allgemeinen Rechnungen zu Operatorexponentialen und geht nur am Rande auf die Magnusentwicklung ein.

B. Programme

B.1. Relevante Codebeispiele

B.1.1. Matrixexponential

Ein wesentlicher Bestandteil der Analyse ist die Berechnung des zeitlichen Propagators \mathbf{e}^{-iHT} . Die Berechnung des Matrixexponentials kann auf vielfältige Weise geschehen, eine ausführliche Übersicht findet sich in Moler & van Loan (2003).

Die Berechnungen dieser Arbeit wurden entweder durch Padésumimation oder über die Bestimmung von Eigenwerten und -vektoren generiert. Die letztere Methode fand dabei häufiger Anwendung.

Das heißt die Exponentiation einer Matrix $A \in \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n$ erfolgt über die Matrix ihrer Eigenvektoren U und der Diagonalmatrix D , die die zugehörigen Eigenwerte enthält

$$A = UDU^{-1} \quad \Rightarrow \mathbf{e}^A = U \mathbf{e}^D U^{-1} . \quad (\text{B.1.1})$$

Das Matrixexponential \mathbf{e}^D wird über die Exponentialfunktion der Diagonaleinträge der Matrix D gebildet, das heißt

$$\mathbf{e}^D = \exp \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots \\ 0 & \ddots & \ddots \\ \vdots & \ddots & d_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}^{d_1} & 0 & \dots \\ 0 & \mathbf{e}^{\dots} & \ddots \\ \vdots & \ddots & \mathbf{e}^{d_n} \end{pmatrix} . \quad (\text{B.1.2})$$

Hier findet sich auch der Grund für die teilweise langwierigen Programmlaufzeiten wieder, da diese Berechnungen nichtlinear mit der Matrizengröße skalieren. Um dies zu minimieren wurden daher Berechnungen an kleineren Spinsystemen durchgeführt.

Genauer gesagt skaliert¹ die Multiplikation $\mathbf{e}^D U^{-1}$ mit $\mathcal{O}(n^2)$ und die verbleibende Multiplikation $U(\mathbf{e}^D U^{-1})$ – wie zu erwarten ist – mit $\mathcal{O}(n^3)$ sofern man sich spezieller Algorithmen, wie etwa des so genannten Strassen-Algorithmus (Press et al. 2002, Kapitel 2.11), bedient. Auf die Verwendung dieser Verfahren wurde hier aber verzichtet, da sie zwangsläufig eine Verringerung der numerischen Genauigkeit bedeuten und der notwendige Mehraufwand in der Implementation die möglichen Gewinne nicht rechtfertigt.

Normalerweise ist auch die Matrixinversion U^{-1} eine laufzeitintensive Operation, da wir im vorliegenden Fall jedoch meist mit hermiteschen Matrizen arbeiten, gilt $U^{-1} = U^\dagger$ und die Bildung der inversen kann schnell erfolgen.

Die konkrete Umsetzung der obigen Formeln geschieht in den jeweiligen C++-Programmen mit Hilfe der boost-Bibliothek (Boost.org 2009) und deren Anbindungen an BLAS/LAPACK (Boost-Sandbox) bereitgestellt durch die optimierte Intel Math Kernel Library (Intel-MKL 101). Die Kompilierung der Programme erfolgt meist mit dem Intel C++-Compiler (Intel-ICPC 110). Die folgenden Abbildungen zeigen dazu relevante Codefragmente.

¹Vergleiche Abschnitt B.2.

Listing B.1 Header

```

1 #include <cmath>

#include <boost/numeric/ublas/symmetric.hpp>
#include <boost/numeric/ublas/matrix_sparse.hpp>
5 #include <boost/numeric/ublas/matrix_proxy.hpp>
#include <boost/numeric/ublas/vector_proxy.hpp>

#include <boost/numeric/bindings/traits/ublas_vector.hpp>
9 #include <boost/numeric/bindings/traits/ublas_matrix.hpp>
#include <boost/numeric/bindings/lapack/syev.hpp>

typedef double PREC;
13 typedef std::complex<PREC> CPLX;

namespace ublas = boost::numeric::ublas;
namespace lapack = boost::numeric::bindings::lapack;

```

Listing B.2 Programmskizze

```

ublas::matrix<PREC> A(n, n);
ublas::matrix<CPLX> expA(n, n);
ublas::vector<PREC> eigval(n);
20 ublas::diagonal_matrix<CPLX, ublas::column_major > expD(n);

//*****
//Filling A
24 //*****

//Calculating Eigenvalues of A (eigval) and Eigenvectors
// (stored in A)
lapack::syev('V', 'U', A, eigval,
28 lapack::optimal_workspace());

//Calculating exp(-i(1-t_s)D)
for (int i = 0; i < n; ++i) {
32 expD(i, i) = std::exp(nimg_ * (1.0 - ts_) * eigval(i));
}

//Building DU-1
noalias(expA) = ublas::prod(herm(A), expD);
36 //Putting things together eA = U(DU-1)
expA = ublas::prod(expA, A);

```

Es wurde auch die Methode `padm` aus der Expokit-Bibliothek (Sidje 1998) umgesetzt. Diese Variante wurde aber nur bedingt genutzt, da die Verwendung optimierter Standardbibliotheken wie LAPACK/BLAS höhere Genauigkeit und Transparenz der Ergebnisse erwarten lässt. Im Falle der Berechnung der analytischen Erwartungen (vergleiche Abschnitte 3.2.2 und 3.2.3) war aber – entgegen dieser Erwartungen – `padm` numerisch stabiler als das andere Verfahren.

B.1.2. Zufallszahlen

Die Wahl von Zufallszahlen zur Generierung der Kopplungen des dipolaren Modells geschieht ebenfalls mit Hilfe der Boost-Bibliothek (Boost.org 2009). Der entsprechende Code (für normalverteilte Kopplungen) ist in folgendem Beispiel gezeigt.

Listing B.3 Header

```

1 #include <boost/math/special-functions/erf.hpp>
2 #include <boost/random/linear_congruential.hpp>
  #include <boost/random/uniform_real.hpp>
  #include <boost/random/normal_distribution.hpp>
  #include <boost/random/variator_generator.hpp>
6
  typedef double PREC;

  typedef boost::mtrand base_generator_type;
10 typedef boost::uniform_real<PREC> uni_distribution;
  typedef boost::normal_distribution<PREC> norm_distribution;

```

Listing B.4 Programmskizze

```

12 void H::rand_lambdanorm(const PREC& mean, const PREC& sigma) {
  base_generator_type generator(static_cast<unsigned
    int>(std::time(0)));
16 norm_distribution dist(mean, sigma);
  boost::variator_generator<base_generator_type&, norm_distribution>
    uni(generator, dist);

  for (int i = 0; i < bath_spins_; ++i) {
20     couplings_(i, i) = uni();
  }
}

```

B.2. Laufzeit und Speicherbedarf

In diesem Abschnitt wird kurz das qualitative Verhalten der implementierten Simulationenwerkzeuge hinsichtlich Laufzeit und Speicherbedarf in Abhängigkeit der Systemgröße untersucht.

Die Berechnung der häufig auftretenden Matrixexponentiale nimmt sowohl in Sachen Speicherbedarf und – damit korreliert – Laufzeit den wesentlichen Anteil im Programmablauf ein².

Obwohl nach Möglichkeit dünn besetzte Matrixklassen³ gewählt wurden, um den Speicherbedarf zu reduzieren, konnte die „Brute-Force-Methode“ der Berechnung der Exponentiale über Eigenwerte und Eigenvektoren davon nur bedingt profitieren. Dies ist einerseits der programmiertechnischen Umsetzung, andererseits der Tatsache geschuldet, dass die Ausgangsmatrizen zwar dünn besetzt sind, die resultierenden Propagatoren im Allgemeinen aber nicht dieser Forderung genügen.

Wie zu erwarten, skaliert der Speicherbedarf exponentiell mit der Zahl N der Spins im betrachteten System (siehe Abbildung B.1).

²siehe B.1.1

³Ausnutzen von Symmetrien und/oder Speicherung nur der Elemente, die von Null verschieden sind.

Der andere limitierende Faktor ist die Laufzeit der Programme, diese hängt maßgeblich von der Zahl der Matrizenmultiplikationen und der Größe der Matrizen ab. Auch dieses Verhalten skaliert – wie erwartet – exponentiell mit der Matrizengröße (siehe Abbildung B.1).

Die in Abbildung B.1 gezeigten Zahlenwerte entstammen einer frühen Programmversion. In späteren Versionen gelang es, Speicherbedarf und Laufzeit zu reduzieren, das qualitative Verhalten bezüglich der Systemgröße N blieb davon aber unberührt, so dass diese qualitative Aussage bestehen bleibt.

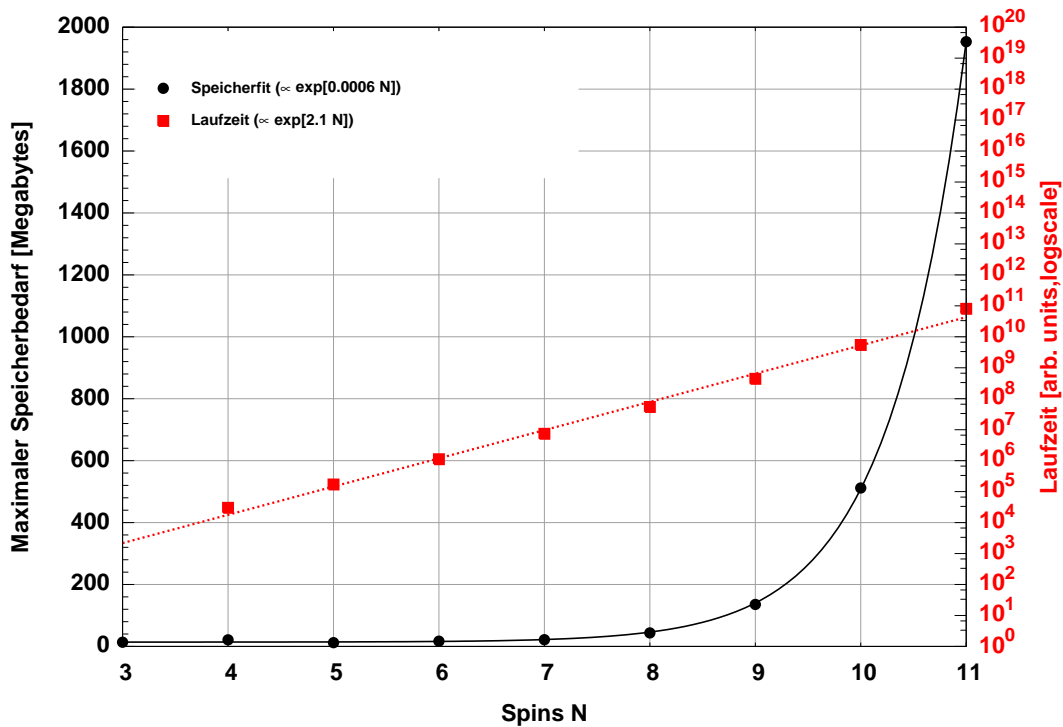


Abbildung B.1 Exemplarischer Speicherbedarf (schwarze Kreise) in MByte und benötigte Laufzeit (rote Quadrate) in willkürlichen Einheiten (Prozessorzeit) in Abhängigkeit der Systemgröße N . Die Werte wurden ermittelt, in dem an 40 Punkten unterschiedlicher Kopplungsparameter λ, ω das Abstandsmaß d numerisch berechnet wurde (vergleiche 3.1) und abschließend maximale Speichernutzung und Gesamtlaufzeit bestimmt wurden. Als Puls diente hier asy3 (asy2). Die Linien sind durch Anpassung an eine Exponentialfunktion (siehe Inlay) entstanden.

Unter Umständen ließen sich Laufzeit und Speicherbedarf durch Nutzung von Symmetrien weiter optimieren. Es bleibt aber fraglich, ob der damit verbundene Aufwand⁴ einen adäquaten Mehrwert erzielen würde. Um wirklich große Systeme $N \gg 20$ zu behandeln dürften andere – konzeptionell abweichende – (Näherungs-)Methoden geeigneter sein.

⁴Adaptieren der entsprechenden Boost-Bibliotheken an LAPACK/BLAS und Nutzung/Implementation effizienterer Matrizenmultiplikationen.

B.3. Kurzanleitungen der benutzten Programmen

B.3.1. dipolar

Aufgabe

Das Programm `dipolar` und sein Bruder `dipolar_new` vergleichen die tatsächliche Zeitentwicklung eines dipolaren Systems unter Wirkung von stückweise konstanten Pulsen mit der gewünschten idealisierten Zeitentwicklung wie sie in den Abschnitten 2.1 und 2.2 formuliert wurden.

Aufruf

```
dipolar <Optionen> -o <outputfile> -i <inputfile>
```

Optionen

Hier sind möglichen Eingabeparameter aufgelistet. Der Ausdruck in eckigen Klammern steht für eine alternative Form, die Option auf der Kommandozeile zu aktivieren/deaktivieren.

- Allgemeine Optionen:
 - v [--version] Versionsinformationen.
 - help Hilfe.
 - c [--config] <arg> Name der Konfigurationsdatei (default: `config.cfg`).
- Allgemeine Konfiguration:
 - n [--spins] <int>] Zahl der Spins N des Systems (Zentralspin + Badspins)
 - reruns <int> Für zufällige Kopplungen wird hier die Zahl der Wiederholungen angegeben (default: 200).
 - o [--output] <arg> Name der Ausgabedatei (default: `out.dat`). Die konkrete Form der Ausgabe richtet sich der Wahl der Parameter.
 - i [--input] <arg> Name der Pulsdatei.
 - p [--pdf] <arg> Wähle Wahrscheinlichkeitsdichte der λ_i bzw. ω_{ij} . Mögliche Eingaben sind `uniform` und `normal` (default: `uniform`).
- Lambda Optionen:
 - ls <int> Skalenfunktion der λ_i (default: 1)
 - lm <arg> Wählt den Modus der λ -Kopplungen. Mögliche Eingaben sind `constant`, `pdf` und `random` (default: `pdf`).
 - lambdalist <arg> Liste von zu testenden λ -Werten (Beispiel: "0.0 0.1 ...").
 - lambdapoints <int> Zahl der λ -Stützstellen pro Dekade (default: 20).
 - lambdamagnmin <int> Untere Dekadengrenze (default: -3, d.h. 1×10^{-3}).
 - lambdamagnmax <int> Obere Dekadengrenze (default: 1, d.h. 1×10^1).
- Alpha Optionen:
 - alphaList <arg> Liste der zu prüfenden α_λ (z.B. "0.0 0.1 ...").
 - alpha0list <arg> Liste der α_ω .
 - alphalist <arg> List der α .
- Omega Optionen:

- os <int> Skalenfunktion der ω_{ij} (default: 1).
- om <arg> Modus der ω -Kopplung. Möglich sind `constant` und `random` (default: `constant`).

Ein-/Ausgabe

Die Eingabe der Pulse erfolgt über eine Datei, in der zeilenweise die relevanten Parameter (Drehwinkel, Zahl der Pulssegmente, τ_s , die Pulsdauern und deren Amplituden) angegeben sind (siehe das nachfolgende Beispiel).

Listing B.5 Pulsdatei `pulse.u2.cfg`

```

1 #Pi/2-Pulse u2 //Namenszeile wird nicht ausgewertet
  0.785398163397448 //Drehwinkel
  3 //Pulssegmente
  0.5 //  $\tau_s$ 
5 0.1315497875 0.736900425 0.1315497875 //Zeitfenster
  -1.65765461 1.65765461 -1.65765461 //Pulsamplituden

```

Die jeweilige Ausgabedatei beinhaltet auch eine Übersicht der gewählten Parameter. Das folgende Beispiel soll dies verdeutlichen.

Listing B.6 Ausgabedatei

```

# Analysis of influence of different couplings: dipolar
2 # Mon Jan 4 14:17:14 2010
# Number of Spins = 4
# Used powers: w = -3.66519 3.66519 -3.66519
# Used durations: t = 0.142857 0.714286 0.142857
6 # Ts = 0.5
# area of pulse = 1.5708
# d = sqrt(max(EV))
# alphas = 0
10 # alphaL = 0.001 0.002 0.003 0.004 ...
#alpha lambdaMean alphaL sigmaLambda omega sizedOmega d
  0 0.001 0.001 1e-06 0 0 1.22932e-07
  0 0.0019 0.001 1.9e-06 0 0 4.43785e-07
14 :

```

B.3.2. `getetas`

Aufgabe

Die Programme `getetas` und `getetas_new` berechnen die Koeffizienten η_{ij} der ersten und zweiten Ordnung für einen gegebenen Puls.

Aufruf

```
getetas -o <outputfile> -i <inputfile>
```

Optionen

- v [--version] Versionsinformationen.
- help Hilfe.
- c [--config] <arg> Name der Konfigurationsdatei (default: `config.cfg`).

-i [--input] <arg> Pulsdatei.
 -o [--output] <arg> Ausgabedatei.

Ein-/Ausgabe

Die Eingabe erfolgt über eine Pulsdatei wie sie in Abbildung B.5 dargestellt ist. Die Ausgabedatei hat später folgende Gestalt:

Listing B.7 Ausgabe von `getetas`.

```
#####
2 Processing: ./ pulse_u2 . cfg
#####
Area/2 = 0.785398
tau_s = 0.5
6 Components = 3
      Durations      Amplitudes
0      0.13155      -1.65765
1      0.7369       1.65765
10     2      0.13155      -1.65765
#####
\eta_{11} = -1.38778e-17
\eta_{12} = -3.93773e-11
14 \eta_{21} = -0.0130473
\eta_{22} = 0
\eta_{23} = 0.051485
```

Funktionsweise

Zur numerischen Berechnung der Integrale (2.1.40) bzw. der Integrale (2.2.42) werden Integrationsroutinen der GNU Scientific Library (GSL 19) genutzt.

Die Berechnung des zweifachen Integrals im Zuge der Berechnung der η_{23} verlangt besondere Aufmerksamkeit. Um eine verbesserte Genauigkeit zu erzielen, werden die Integrationsintervalle jeweils getrennt zwischen den Sprungstellen `switchingtimes[i]` der Pulse ausgewertet und anschließend aufsummiert wie das folgende Codebeispiel zeigt.

Listing B.8 Codeauszug zur Berechnung von (2.1.40e)

```
#include <gsl/gsl_integration.h>
:
double get_eta23b() {
4   double eta23b = 0.0;

   double error;
   double alpha = 0.0; //Dummyvariable
8

   double kernel23b(double, void*);

   //Es folgt die Berechnung von
12   $4 \int_0^{\tau_p} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \Delta t_1 \Delta t_2 v_1 v_2 \sin(\psi_1 - \psi_2)$ 

   F.function = &kernel23b;
   F.params = &alpha;
16  tmpresult = 0.0;
```

```

20   for (int i = 0; i < switchingtimes.size() - 1; ++i) {
        gsl_integration_workspace * W
            = gsl_integration_workspace_alloc(1000);
        gsl_integration_qags(&F, switchingtimes[i], switchingtimes[i +
24   1], 1e-5, 1e-10, 1000,
            W, &tmpresult, &error);
        gsl_integration_workspace_free(W);
        eta23b += tmpresult;
    } //for(int i ...)
    eta23b *= 4.0;
    return eta23b;
} //double get_eta23b

28 //Berechnet  $\Delta t_1 v_1 \int_0^{t_1} \Delta t_2 v_2 \sin(\psi_1 - \psi_2)$ 
double kernel23b(double t1, void *params) {
    double intermediate = 0.0;
32   double error;

    double f2(double, void*);

36   gsl_function F;
    F.function = &f2;
    F.params = &t1;

40   gsl_integration_workspace * w
        = gsl_integration_workspace_alloc(1000);
    gsl_integration_qags(&F, 0.0, t1, 1e-10, 1e-7, 1000,
        w, &intermediate, &error);
44   gsl_integration_workspace_free(w);

    return (get_delta(t1) * get_v(t1) * intermediate);
} //double kernel23b

48 //Berechnet  $\Delta t_2 v_2 \sin(\psi_1 - \psi_2)$ 
double f2(double t2, void* params) {
    const double * t1 = static_cast<double*>(params);
52   return (
        get_delta(t2) * get_v(t2) *
        std::sin(get_psi(*t1) - get_psi(t2))
    );
56 } //double f2

```

Die Berechnung von (2.2.42e) erfolgt in ähnlicher Art und Weise bei Nutzung von `getetas_new`.

B.3.3. datafit3

Aufgabe

Dieses Programm passt eine Funktion der Form $a \cdot x^b$ an gegebene Daten an. Die Situation wird in Abbildung B.2 veranschaulicht.

Aufruf

```
datafit3 <Optionen> -o <outputfile> -i <inputfile>
```

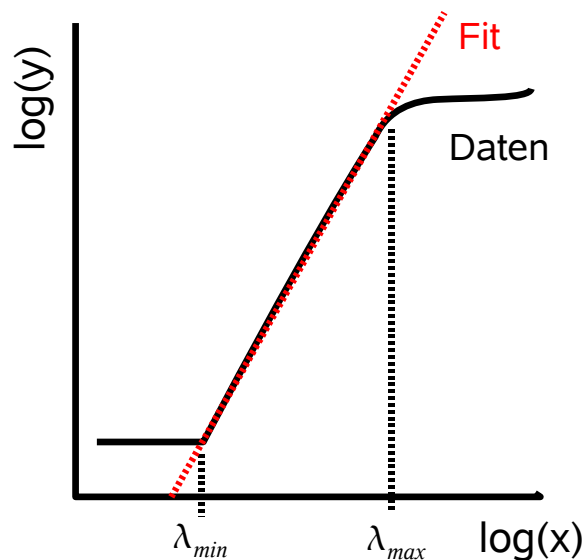


Abbildung B.2 Veranschaulichung der Funktionsweise des Programms `datafit3`. Gegeben ist ein Datensatz (hier logarithmisch aufgetragen) aus dem `datafit3` die Parameter λ_{\min} , λ_{\max} und die Fitparameter a und b sowie deren Fehler bestimmt.

Optionen

- `--dynamicjmin` λ_{\min} soll dynamisch bestimmt werden.
- `--dynamicjmax` λ_{\max} soll wird dynamisch bestimmt werden.
- `-p [--points <int>` Legt fest, wie viele Datenpunkte für den Fit maximal genutzt werden.
- `--sumslim <double>` Legt fest, ab welcher Abweichung die obere Grenze des Fits λ_{\max} als erreicht gilt.
- `--varlim <double>` Legt fest, ab welcher Varianz der konstante Part (Bestimmung von λ_{\min} als erreicht gilt.
- `--exponent <double>` Legt den Exponenten b fest.
- `-u [--upperbound] <double>` Legt λ_{\max} fest.
- `-l [--lowerbound] <double>` Legt λ_{\min} fest.
- `-o [--output] <arg>` Ausgabedatei
- `-i [--input] <arg>` Die Eingabedatei muss in der Form "x<TAB>y" vorliegen.
- `--version` Versionsinformationen.
- `-h, --help` Hilfe.

Beispiele

- `datafit3 --dynamicjmin --dynamicjmax -o out.dat -i in.dat`

Benutzt die Daten aus `in.dat` und schreibt sie nach `out.dat`. Anfangs- und Endpunkt des Fits werden dynamisch bestimmt. Die Ausgabe in `out.dat` hat dann exemplarisch folgende Gestalt

Listing B.9 Ausgabe von datafit3

```

Processing file in.dat
2 #####
# Dynamical calculation of max fitting range
# Dynamical calculation of min fitting range
# Fitting function: d = (a +/- da) * lambda^(b +/- db)
6 #####
# Dynamic Xmin
  nmin = 0
  xmin = 0.001
10  log(ymean) = 0
  ymean = 1
  yvariance = 0
#####
14 # Upper limit at
  nmax = 6
  nused = 6
  ntot = 127
18  xmax = 0.007
  sumsqr = 0.0846067
  y(xmax) = 1.71723
#####
22  a = 49206.8660
  da = 2e+04
  b = 2.000000
  db = 0

```

- `datafit2 --dynamicjmin --dynamicjmax --exponent 2 -o out.dat -i in.dat`
Hier wird der Exponent b auf 2 festgelegt.

Funktionsweise

Hier werden kurz einige relevante Quellcodebeispiele des Programms gezeigt. Die untere Grenze wird mit Hilfe der Statistikfunktionen der GNU Scientific Library (GSL 19) bestimmt.

Listing B.10 Bestimmung von λ_{\min}

```

#include <gsl/gsl_statistics.h>
:
3 double mean = 600.0;
  double variance = 666.0;

  int nmin = n; //Gesamtzahl der Datenpunkte
7
  while (variance > CFG::variance_limit || nmin == 1) {
    --nmin;
    mean = gsl_stats_mean(const_cast<double*> (Y), 1, nmin);
11    variance = gsl_stats_variance_m(const_cast<double*> (Y), 1, nmin,
      mean);
  }

```

Wird die obere Grenze dynamisch bestimmt, so geschieht das über die vorgegebene Abweichung, die die Fitfunktion aufweisen darf. Dazu wird sukzessive mit Hilfe der GSL ausgehend vom kompletten Datensatz die Obergrenze so lange verschoben, bis diese erlaubte Abweichung unterschritten wird. Da die GSL bereits über Algorithmen zur linearen Optimierung verfügt, werden die Daten im Vorfeld logarithmiert.

Listing B.11 Bestimmung von λ_{\max} .

```
#include <gsl/gsl_fit.h>
:
4  if (CFG::dynamic_jmax) {
    for (nmax = n; nmax > nmin; --nmax) {
      if (CFG::fixedexp) {
        c1 = CFG::exponent;
        FIT::fixed_exp(c1, X + nmin, Y + nmin, nmax - nmin,
          c0, cov00, sumsqr);
8      cov11 = 0.0;
      } else {
        gsl_fit_linear(X + nmin, 1, Y + nmin, 1, nmax - nmin,
          &c0, &c1, &cov00, &cov01, &cov11,
12      &sumsqr);
      }
      if (sumsqr < CFG::sumsquare_limit) {
        break;
16      } //if (sumsqr < ...)
    } //for (nselect ...)
  } //if (dynamic_jmax)
```

Abkürzungen

BB84 Quantenkryptographieprotokoll.

bzgl. bezüglich.

bzw. beziehungsweise.

CPMG Carr-Purcell-Meiboom-Gill.

CUDD Concatenated Uhrig Dynamical Decoupling.

CW Continuous Wave.

d.h. das heißt.

DD Dynamical Decoupling.

etc. et cetera.

FID Free Induction Decay.

ggf. gegebenenfalls.

GSL GNU Scientific Library.

iPDF inverse Probability Density Function.

ITRS International Technology Roadmap for Semiconductors.

MRT Magnetic Resonance Tomography.

NMR Nuclear Magnetic Resonance (Kernspinresonanz).

normal Normalverteilung.

QDD Quadratic Dynamical Decoupling.

RND Randomisiert.

SI Système international d'unités.

UDD Uhrig Dynamical Decoupling.

uni Gleichverteilung.

US United States (of America).

z.B. zum Beispiel.

Literaturverzeichnis

Anderson et al. 1999

ANDERSON, E. ; BAI, Z. ; BISCHOF, C. ; BLACKFORD, S. ; DEMMEL, J. ; DONGARRA, J. ; DU CROZ, J. ; GREENBAUM, A. ; HAMMARLING, S. ; MCKENNEY, A. ; SORENSEN, D.: **LAPACK Users' Guide**. Third. Philadelphia, PA : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999 <http://www.netlib.org/lapack/lug/index.html>. – ISBN 0–89871–447–8 (paperback)

Bennett & Brassard 1984

BENNETT, C.H. ; BRASSARD, G.: Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. Bangalore, India, December 1984 (Systems, and Signal Processing)

Blanes et al. 2010

BLANES, S ; CASAS, F ; OTEO, J A. ; ROS, J: A pedagogical approach to the Magnus expansion. In: **European Journal of Physics** 31 (2010), Nr. 4, 907

Blanes et al. 2009

BLANES, S. ; CASAS, F. ; OTEO, J.A. ; ROS, J.: The Magnus expansion and some of its applications. In: **Physics Reports** 470 (2009), Nr. 5–6, 151 - 238. – DOI 10.1016/j.physrep.2008.11.001. – ISSN 0370–1573

Boost-Sandbox

BOOST-SANDBOX: BOOST: Numerical Bindings. <http://boost-sandbox.cvs.sourceforge.net/boost-sandbox/boost-sandbox/boost/numeric/bindings/>

Boost.org 2009

BOOST.ORG: BOOST. <http://www.boost.org/>. Version: Februar 2009 (1.38)

Burum 1981

BURUM, D. P.: Magnus expansion generator. In: **Phys. Rev. B** 24 (1981), Oct, Nr. 7, S. 3684–3692. – DOI 10.1103/PhysRevB.24.3684

Carr & Purcell 1954

CARR, H. Y. ; PURCELL, E. M.: Effects of Diffusion on Free Precession in Nuclear Magnetic Resonance Experiments. In: **Phys. Rev.** 94 (1954), May, Nr. 3, S. 630–638. – DOI 10.1103/PhysRev.94.630

Cummins & Jones 2000

CUMMINS, H K. ; JONES, J A.: Use of composite rotations to correct systematic errors in NMR quantum computation. In: **New Journal of Physics** 2 (2000), 6

Cummins et al. 2003

CUMMINS, Holly K. ; LEWELLYN, Gavin ; JONES, Jonathan A.: Tackling systematic errors in quantum logic gates with composite rotations. In: **Phys. Rev. A** 67 (2003), Apr, Nr. 4, S. 042308. – DOI 10.1103/PhysRevA.67.042308

Dass 2005

DASS, T.: Measurements and decoherence. <http://arxiv.org/abs/quant-ph/0505070v1>.
Version: May 2005

DiVincenzo 2000

DiVINCENZO, D.P.: The physical implementation of quantum computation. In: **Fortschr. Phys.** 48 (2000), 771–783

Dyson 1949

DYSON, F. J.: The Radiation Theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman. In: **Phys. Rev.** 75 (1949), Feb, Nr. 3, 486–502. – DOI 10.1103/PhysRev.75.486

Ernst et al. 2004

ERNST, Richard R. ; BODENHAUSEN, Geoffrey ; WOKAUN, Alexander ; ROWLINSON, J. S. (Hrsg.): **Principles of Nuclear Magnetic Resonance in one and two Dimensions**. Oxford : Oxford University Press, 2004

Fauseweh et al. 2011

FAUSEWEH, Benedikt ; PASINI, Stefano ; UHRIG, Götz S.: Frequency modulated pulses for quantum bits coupled to time-dependent baths. <http://de.arxiv.org/abs/1112.0446>.
Version: Dezember 2011

Fortunato et al. 2002

FORTUNATO, E. M. ; PRAVIA, M. A. ; BOULANT, N.: Design of strongly modulating pulses to implement precise effective Hamiltonians for quantum information processing. In: **J. Chem. Phys.** 116 (2002), May, Nr. 17, 7599. – DOI 10.1063/1.1465412 I.

Freude 2006

FREUDE, Dieter: Vorlesung Festkörper-NMR. <http://uni-leipzig.de/~energy/freunmr.html>. Version: 2006

Goldberger & Watson 1967

GOLDBERGER, Marvin L. ; WATSON, Kenneth M.: **Collision theory**. 3. New York : Wiley, 1967

Greilich et al. 2006

GREILICH, A. ; YAKOVLEV, D. R. ; SHABAEV, A. ; EFROS, Al. L. ; YUGOVA, I. A. ; OULTON, R. ; STAVARACHE, V. ; REUTER, D. ; WIECK, A. ; BAYER, M.: Mode Locking of Electron Spin Coherences in Singly Charged Quantum Dots. In: **Science** 313 (2006), Nr. 5785, 341-345. – DOI 10.1126/science.1128215

GSL 19

GSL: GNU Scientific Library. <http://www.gnu.org/software/gsl/>. Version: 19

Haeberlen & Waugh 1968

HAEBERLEN, U. ; WAUGH, J. S.: Coherent Averaging Effects in Magnetic Resonance. In: **Phys. Rev.** 175 (1968), Nov, Nr. 2, 453–467. – DOI 10.1103/PhysRev.175.453

Hahn 1950

HAHN, E. L.: Spin Echoes. In: **Phys. Rev.** 80 (1950), Nov, Nr. 4, S. 580–594. – DOI 10.1103/PhysRev.80.580

Hirjibehedin et al. 2006

HIRJIBEHEDIN, Cyrus F. ; LUTZ, Christopher P. ; HEINRICH, Andreas J.: Spin Coupling

in Engineered Atomic Structures. In: **Science** 312 (2006), Nr. 5776, 1021-1024. – DOI 10.1126/science.1125398

Intel-ICPC 110

INTEL-ICPC: Intel Compiler. <http://software.intel.com/en-us/intel-compilers/>.
Version: 11.0

Intel-MKL 101

INTEL-MKL: MKL: Math Kernel Library. <http://software.intel.com/en-us/intel-mkl/>. Version: 10.1

Jenista et al. 2009

JENISTA, Elizabeth R. ; STOKES, Ashley M. ; BRANCA, Rosa T. ; WARREN, Warren S.: Optimized, unequal pulse spacing in multiple echo sequences improves refocusing in magnetic resonance. In: **The Journal of Chemical Physics** 131 (2009), Nr. 20, 204510. – DOI 10.1063/1.3263196

Karbach et al. 2008

KARBACH, P. ; PASINI, S. ; UHRIG, G. S.: Numerical analysis of optimized coherent control pulses. In: **Phys. Rev. A** 78 (2008), Nr. 2, 022315. – DOI 10.1103/PhysRevA.78.022315

Klarsfeld & Oteo 1989

KLARSFELD, S. ; OTEO, J. A.: Recursive generation of higher-order terms in the Magnus expansion. In: **Phys. Rev. A** 39 (1989), Apr, Nr. 7, S. 3270–3273. – DOI 10.1103/PhysRevA.39.3270

Lacelle & Tremblay 1995

LACELLE, Serge ; TREMBLAY, Luc: Dipolar interactions in magnetically very diluted spin networks. In: **The Journal of Chemical Physics** 102 (1995), Nr. 2, 947-955. – DOI 10.1063/1.469162

Leggett 2002

LEGGETT, A. J.: Qubits, cbits, decoherence, quantum measurement and environment. In: HEISS, D. (Hrsg.): **Fundamentals of Quantum Information** Bd. 587. Berlin : Springer, 2002, Kapitel 2, S. 3–46

Levitt 2005

LEVITT, Malcolm H.: **Spin Dynamics**. Weinheim : John Wiley & Sons, LTD, 2005

Magnus 1954

MAGNUS, Wilhelm: On the exponential solution of differential equations for a linear operator. In: **Comm. Pure and Appl. Math.** 7 (1954), Nr. 4, 649-673. – DOI 10.1002/cpa.3160070404

Maletinsky & Imamoglu 2009

MALETINSKY, Patrick ; IMAMOGLU, Atac: Quantum Dot Nuclear Spin Polarization. Version: 2009. <http://www.springer.com/series/3705>. In: MICHLER, Peter (Hrsg.): **Single Semiconductor Quantum Dots**. Berlin : Springer, 2009 (Nanoscience and Technology), Kapitel 5, 145-184

Meiboom & Gill 1958

MEIBOOM, S. ; GILL, D.: Modified Spin-Echo Method for Measuring Nuclear Relaxation Times. In: **Review of Scientific Instruments** 29 (1958), Nr. 8, 688-691. – DOI 10.1063/1.1716296

Moler & van Loan 2003

MOLER, C. ; VAN LOAN, C.: Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later. In: **SIAM Review** 45 (2003), Nr. 1, 3 - 49

Moore 1965

MOORE, G. E.: Cramming more components onto integrated circuits. In: **Electronics** 38 (1965), April, Nr. 8

Nielsen & Chuang 2000

NIELSEN, Michael A. ; CHUANG, Isaac L.: **Quantum Computation and Quantum Information**. Cambridge University Press, 2000. – ISBN 0521635039

Oteo & Ros 2000

OTEO, J. A. ; ROS, J.: From time-ordered products to Magnus expansion. In: **Journal of Mathematical Physics** 41 (2000), Nr. 5, 3268-3277. – DOI 10.1063/1.533304

Pasini et al. 2008

PASINI, S. ; FISCHER, T. ; KARBACH, P. ; UHRIG, G. S.: Optimization of short coherent control pulses. In: **Phys. Rev. A** 77 (2008), Nr. 3, 032315. – DOI 10.1103/PhysRevA.77.032315

Pasini et al. 2009

PASINI, S. ; KARBACH, P. ; RAAS, C. ; UHRIG, G. S.: Optimized pulses for the perturbative decoupling of a spin and a decoherence bath. In: **Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)** 80 (2009), Nr. 2, 022328. – DOI 10.1103/PhysRevA.80.022328

Pasini & Uhrig 2008

PASINI, S ; UHRIG, G S.: Generalization of short coherent control pulses: extension to arbitrary rotations. In: **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical** 41 (2008), Nr. 31, 312005 (12pp)

Pasini & Uhrig 2010

PASINI, Stefano ; UHRIG, Götz S.: Optimized dynamical decoupling for time-dependent Hamiltonians. In: **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical** 43 (2010), Nr. 13, 132001

Pasini, S. et al. 2011

PASINI, S. ; KARBACH, P. ; UHRIG, G. S.: High-order coherent control sequences of finite-width pulses. In: **EPL** 96 (2011), Nr. 1, 10003. – DOI 10.1209/0295-5075/96/10003

Perez-Delgado & Kok 2009

PEREZ-DELGADO, Carlos A. ; KOK, Pieter: What is a quantum computer, and how do we build one? Juni 2009

Press et al. 2002

PRESS, William H. ; TEUKOLSKY, Saul A. ; VETTERLING, William T. ; FLANNERY, Brian P.: **Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing**. Cambridge University Press, 2002. – ISBN 0-521-75033-4

Rastelli et al. 2009

RASTELLI, Armando ; KIRAVITTAYA, Suwit ; SCHMIDT, Oliver G.: Growth and Control of Optically Active Quantum Dots. Version: 2009. <http://www.springer.com/series/3705>. In: MICHLER, Peter (Hrsg.): **Single Semiconductor Quantum Dots**. Berlin : Springer, 2009 (Nanoscience and Technology), Kapitel 2, 31-69

Rios 2010

RIOS, Jeronimo M.: Quantum manipulation of nitrogen-vacancy centers in diamond: from basic properties to applications, Harvard University, Diss., 2010. lukin.physics.harvard.edu/Theses/MyThesis.pdf

Rong et al. 2011

RONG, Xing ; WANG, Ya ; YANG, JiaHui ; ZHU, JinXian ; XU, WanJie ; FENG, PengBo ; WEN, XuJie ; SU, JiHu ; DU, JiangFeng: Dynamical decoupling of electron spins in phosphorus-doped silicon. In: **Chinese Science Bulletin** 56 (2011), 591-597. – ISSN 1001-6538. – 10.1007/s11434-010-4321-y

Schliemann et al. 2003

SCHLIEMANN, John ; KHAETSKII, Alexander ; LOSS, Daniel: Electron spin dynamics in quantum dots and related nanostructures due to hyperfine interaction with nuclei. In: **Journal of Physics: Condensed Matter** 15 (2003), Nr. 50, R1809-R1833

Sidje 1998

SIDJE, R. B.: Expokit: A Software Package for Computing Matrix Exponentials. In: **ACM Transactions on Mathematical Software** 24 (1998), March, Nr. 1, S. 130 – 156

Singh 2003

SINGH, Simon: **Geheime Botschaften**. 4. München : dtv, 2003

Slichter 1992

SLICHTER, Charles P.: **Principles of Magnetic Resonance**. 3. Heidelberg : Springer, 1992 (Solid-State Science 1)

Stadelhofer 2006

STADELHOFER, R.: Evolving Blackbox Quantum Algorithms using Genetic Programming, Department of Physics University of Dortmund Germany, Diss., May 2006

Stolze & Suter 2004

STOLZE, J. ; SUTER, D.: **Quantum Computing**. Weinheim : Wiley-VCH, 2004

Stone 2005

STONE, N.J.: Table of nuclear magnetic dipole and electric quadrupole moments. In: **Atomic Data and Nuclear Data Tables** 90 (2005), Nr. 1, 75 - 176. – DOI DOI: 10.1016/j.adt.2005.04.001. – ISSN 0092-640X

Suter & Böhmer 2009

SUTER, Dieter ; BÖHMER, Roland: Vorlesung Magnetische Resonanz. http://e3.physik.uni-dortmund.de/Vorlesungen/MR_09/MR_09.html. Version: 2009

Titman 2009

TITMAN, Jeremy: Vorlesung Nuclear Spin Hamiltonian II: Couplings. University of Nottingham. http://web.mac.com/jeremytitman/Solid-state_NMR_Group/Lectures_files/Lecture3.pdf. Version: 2009

Tsai 2007

TSAI, Dung-Bang: expm_pad. <http://lists.boost.org/MailArchives/ublas/att-2477/expm.hpp>. Version: 2007

Uhrig 2007

UHRIG, G. S.: Keeping a Quantum Bit Alive by Optimized Pi-Pulse Sequences. In: **Phys. Rev. Lett.** 98 (2007), 100504. – DOI 10.1103/PhysRevLett.98.100504

Uhrig 2009

UHRIG, Götz S.: Concatenated Control Sequences Based on Optimized Dynamic Decoupling. In: **Phys. Rev. Lett.** 102 (2009), Mar, Nr. 12, 120502. – DOI 10.1103/PhysRevLett.102.120502

Uhrig & Pasini 2010

UHRIG, Götz S. ; PASINI, Stefano: Efficient coherent control by sequences of pulses of finite duration. In: **New Journal of Physics** 12 (2010), Nr. 4, 045001. – DOI 10.1088/1367-2630/12/4/045001

Vega 2004

VEGA, Alexander J.: Controlling the effects of pulse transients and RF inhomogeneity in phase-modulated multiple-pulse sequences for homonuclear decoupling in solid-state proton NMR. In: **Journal of Magnetic Resonance** 170 (2004), Nr. 1, 22 - 41. – DOI 10.1016/j.jmr.2004.05.017. – ISSN 1090-7807

Weingarten 2001

WEINGARTEN, Klaus: Ein- und zweidimensionale Hadamard-Kernresonanz-Spektroskopie, RWTH Aachen - Fachbereich 1, Diss., 2001. <http://darwin.bth.rwth-aachen.de/opus3/volltexte/2001/205/>

Weinzierl 2000

WEINZIERL, Stefan: Introduction to Monte Carlo methods. <http://de.arxiv.org/abs/hep-ph/0006269>. Version: 2000

Wesenberg & Mølmer 2004

WESENBERG, Janus H. ; MØLMER, Klaus: Field Inside a Random Distribution of Parallel Dipoles. In: **Phys. Rev. Lett.** 93 (2004), Sep, Nr. 14, S. 143903. – DOI 10.1103/PhysRevLett.93.143903

West et al. 2010

WEST, Jacob R. ; FONG, Bryan H. ; LIDAR, Daniel A.: Near-Optimal Dynamical Decoupling of a Qubit. In: **Phys. Rev. Lett.** 104 (2010), Apr, 130501. – DOI 10.1103/PhysRevLett.104.130501

Wilcox 1967

WILCOX, R. M.: Exponential Operators and Parameter Differentiation in Quantum Physics. In: **Journal of Mathematical Physics** 8 (1967), Nr. 4, 962-982. – DOI 10.1063/1.1705306

Zhirnov et al. 2003

ZHIRNOV, V.V. ; CAVIN, III R.K. ; HUTCHBY, J.A. ; BOURIANOFF, G.I.: Fello. In: **PROCEEDINGS OF THE IEEE** 91 (2003), November, Nr. 11, S. 2003. – DOI 10.1109/JPROC.2003.818324

Zrenner et al. 2002

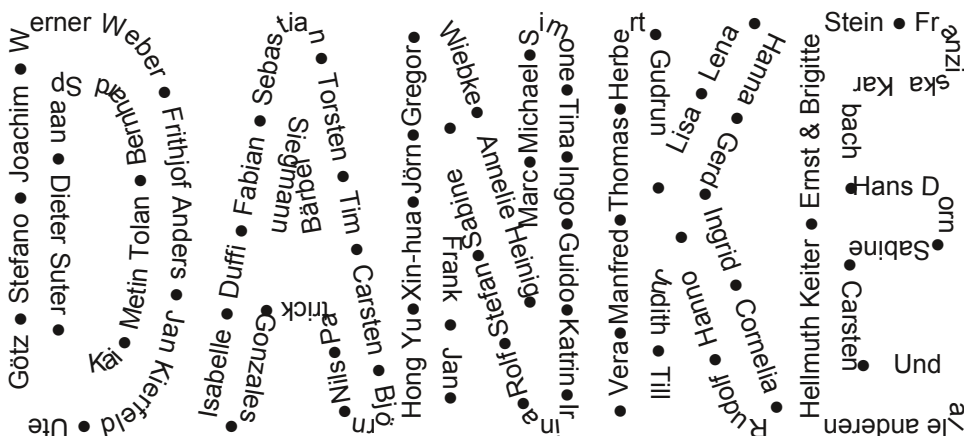
ZRENNER, A. ; BEHAM, E. ; STUFLER, S. ; FINDEIS, F. ; BICHLER, M. ; ABSTREITER, G.: Coherent properties of a two-level system based on a quantum-dot photodiode. In: **Nature** 418 (2002), 612-614. – DOI doi:10.1038/nature00912

Danksagung

Eine Vielzahl an Menschen haben mich in Laufe dieser Arbeit gestützt und mir in schwierigen Zeiten beigestanden. Ganz besonders möchte ich Katharina danken, die mir trotz aller Widrigkeiten beigestanden hat, mir immer wieder ein Lächeln auf die Lippen gezaubert hat und die mich aufgebaut hat, wenn ich kurz davor war alles aufzugeben.

Auch meinen Betreuern Prof. Dr. Götz S. Uhrig, Prof. Dr. Joachim Stolze und Dr. Stefano Pasini danken ich für die gute Betreuung, konstruktive Ratschläge in allen Lebenslagen und nicht zuletzt der fachlichen Unterstützung wegen, die diese Arbeit erst ermöglicht hat. Auch allen anderen Lehrstuhlangehörigen danke ich von ganzem Herzen! Insbesondere Dr. Carsten Raas, der es irgendwie geschafft hat, meinen Rechner immer wieder zur Kooperation zu bewegen.

Selbstverständlich danke ich auch meiner Familie, die es trotz schwierigster Umstände immer wieder geschafft hat, mir unter die Arme zu greifen. Auch all meinen Freunden bin ich zu großem Dank verpflichtet!



☺ Katharina

Natürlich danke ich auch all denen, die in der Abbildung leider keinen Platz mehr gefunden haben und die mich ein Stück meines bisherigen Weges begleitet haben!

