

## 相互作用的量子系统模型及其物理控制过程

丛 爽

(中国科学技术大学 自动化系, 安徽 合肥 230027)

**摘要:** 在充分考虑量子系统中粒子之间的相互作用以及可能需要的几何控制的基础上, 建立了一个变量在李群的  $SU(4)$  上变化的、两个具有相互作用的自旋  $1/2$  粒子系统的数学模型. 详细地描述了对具有相互作用的量子系统的物理控制过程. 为进一步对量子系统有关的可控性、操纵以及反馈控制做好了准备工作.

**关键词:** 自旋  $1/2$  粒子; 量子系统模型; 相互作用; 李群

**中图分类号:** TP202

**文献标识码:** A

## Quantum system model of interaction quantum system and its physical control procedure

CONG Shuang

(Department of Automation, University of Science and Technology of China, Hefei Anhui 230027, China)

**Abstract:** Based on the interaction between particles of quantum system and the possible geometric control to be applied, a mathematical model of two spin  $1/2$  particle system with interaction is built, whose variables are varying in the Lie groups of  $SU(4)$ . The physical control procedure of the quantum system with interaction is described in detail. This work is a preparation for further research on controllability, manipulation and feedback control of quantum system.

**Key words:** spin  $1/2$  particle; quantum system model; interaction; Lie groups

## 1 引言 (Introduction)

量子系统控制的一个主要目标就是量子系统状态的制备与操纵, 尤其对量子光学和量子通讯中的量子系统的操纵, 主要都是通过被控系统或粒子或围绕它的场的相互作用来实施的. 系统控制总是建立在被控系统的模型基础之上的. 当我们仅考虑由孤立的单个量子所组成的量子系统模型, 实际上是在理想状况下, 即在绝对零度的条件下才能获得的结果. 该温度条件意味着与能级差异相比, 温度非常小. 当不满足此条件时, 或在更一般的情况下, 我们需要考虑建立粒子之间的相互作用下的量子系统模型.

具有不为零角动量的最简单系统是自旋  $1/2$  粒子. 作为控制系统的被控对象, 自旋  $1/2$  量子系统有其自身独特的优越性. 所以, 有必要很好地研究自旋  $1/2$  系统. 被研究的粒子通常还具有其他一些特性, 如运动学能量, 轨迹角动量等. 不过, 目前我们只集中在对粒子自旋特性的研究上. 众所周知, 对单个量子位状态的控制与操纵可以通过将被控系统处于  $z$

轴正向指向的定常均匀磁场中, 人为施加一个外部的平行  $x-y$  平面的旋转控制磁场并使其与原磁场频率共振一个时间长度来达到. 实际上, 在对系统的控制过程中, 是存在着非共振因素的影响的, 即不是在理想的条件下, 则无法确保所施加的脉冲一定只作用在所控制的粒子上. 所以有必要进一步研究两个相邻粒子之间的相互作用. 本文首先考虑在所有的  $x, y$  和  $z$  3 个方向磁场的作用下, 两个自旋  $1/2$  粒子之间的相互作用及其每一个自旋的自身作用, 根据薛定谔方程建立其被控系统的数学模型.

2 自旋  $1/2$  系统相互作用的哈密顿量  
(Hamilton of interaction of spin  $1/2$  system)

用来描述两个物质之间能量的相互作用的自旋矢量  $I_j$  和  $I_k$  是海森伯格 (Heisenberg) 模型

$$(\text{能量}) \propto -J I_j I_k, \quad (1)$$

其中  $J > 0$  为相互作用强度, 是一个定常系数.

当将式(1)限制在只取自旋矢量的  $z$  分量时, 则

得到常用的 Ising 模型

$$(\text{能量}) \propto -J \sum_{jz} I_{jz}, \quad (2)$$

为了建立考虑两个相邻粒子之间的相互作用的量子系统的数学模型,众所周知,在  $t$  时刻量子力学系统的状态  $|\psi(t)\rangle$  的演化由薛定谔方程决定

$$i\hbar |\dot{\psi}\rangle = H(t) |\psi\rangle, \quad (3)$$

其中,  $\hbar$  是普朗克常数;  $H: H \rightarrow H^*$  是哈密顿算符,且  $H = H^*$ , 因此其本征值是实数.

系统的哈密顿被假定为由未受扰动的(或内部的)哈密顿  $H_0$  与受微扰动的(或外部的)哈密顿  $H_1(t)$  之和的形式组成

$$H(t) = H_0 + H_1(t). \quad (4)$$

当考虑一般的海森伯格模型的相互作用时,两个自旋  $1/2$  粒子系统内部未受扰动的哈密顿  $H_0$  为(为方便起见,令  $\hbar = 1$ )

$$H_0 = -(\gamma_1 \bar{u}_z I_{1z} + \gamma_2 \bar{u}_z I_{2z}) - J \sum_{k=x,y,z} I_{1k} I_{2k}, \quad (5)$$

其中两粒子分别具有不同的回旋磁比(gyromagnetic ratios)  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$ ;  $\bar{u}_z$  为一个定常磁场强度.

在外加一个平行于  $x$ - $y$  平面的可控变化的圆形极化磁场的作用下,可得系统外部扰动的哈密顿  $H_1$  为

$$H_1(t) = -(\gamma_1 I_{1x} u_x(t) + \gamma_1 I_{1y} u_y(t) + \gamma_2 I_{2x} u_x(t) + \gamma_2 I_{2y} u_y(t)). \quad (6)$$

由此可以写出被控系统的总的哈密顿  $H$  为

$$H(t) = H_0 + H_1(t) = -\sum_{k=x,y} (\gamma_1 I_{1k} + \gamma_2 I_{2k}) u_k(t) - (\gamma_1 I_{1z} + \gamma_2 I_{2z}) \bar{u}_z - J \sum_{k=x,y,z} I_{1k} I_{2k}. \quad (7)$$

作为更一般情况的考虑:在一个可以对其进行控制的  $z$  方向磁场  $u_z$  的作用下(定常磁场是其中的一个特例),此时式(7)可以写为:

$$H(t) = -\sum_{k=x,y,z} (\gamma_1 I_{1k} + \gamma_2 I_{2k}) u_k(t) - J \sum_{k=x,y,z} I_{1k} I_{2k}. \quad (8)$$

式(8)中右端第1项代表两粒子在外加磁场作用下随时间变化的相互作用;第2项是两粒子之间的相互作用,为海森伯格模型,其形式为:  $a I_{1x} I_{2x} + b I_{1y} I_{2y} + c I_{1z} I_{2z}$ . 当取  $a = 0, b = 0, c = J \neq 0$  时,则为 Ising 相互作用模型. 对于  $k = x, y, z$  有

$$I_{1k} = \frac{1}{2} \sigma_k \otimes \mathbf{1}, I_{2k} = \mathbf{1} \otimes \frac{1}{2} \sigma_k, \quad (9)$$

$$I_{1k} I_{2k} = \sigma_k \otimes \sigma_k, k = x, y, z, \quad (10)$$

其中  $\sigma_k, k = x, y, z$  为泡利矩阵  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_y =$

$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \mathbf{1}$  为  $2 \times 2$  单位矩阵

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

### 3 薛定谔方程与系统模型 (Schrödinger equation and system model)

对于具有初始条件  $|\psi(0)\rangle$  的情况,可以得到薛定谔方程(3)的解  $|\psi(t)\rangle$  为<sup>[1]</sup>:

$$|\psi(t)\rangle = X(t) |\psi(0)\rangle. \quad (12)$$

其中  $X(t)$  称为演化算符,它同样满足薛定谔方程. 本文中所研究的自旋  $1/2$  粒子系统演化算符  $X$  的薛定谔方程可以写为

$$\dot{X} = -iH(t)X, \quad (13)$$

其中  $H(t)$  由式(8)给出.

我们考虑在所确定的4维希尔伯特空间中的基  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ . 在这组基下,式(9)和(10)中所表示的张积是  $2 \times 2$  算符矩阵的 Kronecker 积(直乘). 通过直乘运算和相似变换可以将式(13)写成如下的形式:

$$\dot{X} = \bar{A}X + \bar{B}_x X u_x + \bar{B}_y X u_y + \bar{B}_z X u_z, \quad (14)$$

其中:  $\bar{A} = iJ \sum_{k=x,y,z} I_{1k} I_{2k}; \bar{B}_x = i\gamma_1 (I_{1x} + r I_{2x}); \bar{B}_y = i\gamma_1 (I_{1y} + r I_{2y}); \bar{B}_z = i\gamma_1 (I_{1z} + r I_{2z}); r = \gamma_1/\gamma_2$ .

矩阵  $\bar{A}, \bar{B}_x, \bar{B}_y$  和  $\bar{B}_z$  是  $4 \times 4$  具有阵迹为零的斜厄米矩阵,即为  $SU(4)$  中的矩阵. 通过对式(14)中的参数进行坐标变换<sup>[2]</sup>:

$$X \rightarrow TXT'; T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & i & -i & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 & -i \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

并调整控制变量幅值,最终可使方程(14)的形式变为

$$\dot{X} = AX + B_x X u_x + B_y X u_y + B_z X u_z, \quad (15)$$

其中

$$A: = \text{diag}(-3i, i, i, i);$$

$$B_x: = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -(r-1) \\ 0 & 0 & r+1 & 0 \\ 0 & -(r+1) & 0 & 0 \\ r-1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$B_y: = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -(r-1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(r+1) \\ r-1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & r+1 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$B_z: = \begin{pmatrix} 0 & -(r-1) & 0 & 0 \\ r-1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r+1 \\ 0 & 0 & -(r+1) & 0 \end{pmatrix}.$$

式(15)就是在考虑了两个粒子之间的相互作用后,自旋1/2粒子量子系统模型的具体表达形式. 进而,当相互作用模型取 Ising 模型,即取式(14)中的  $\bar{A} = \bar{A}_1 = iJ_{12}I_{2z}$  时,相似变换以后的矩阵  $A_1$  为:

$$A_1 = \text{diag}(-i, -i, i, i). \quad (16)$$

在获得式(15)模型后,该量子系统的控制问题即可变为寻找控制函数  $u_x, u_y$  和  $u_z$  来操纵状态演化矩阵  $X$  到在  $SU(4)$  上期望的值,为一个在李群上的操纵问题. 大量有关经典力学上的几何控制的应用都可以帮助我们来解决有关量子系统的可控性以及操纵和反馈控制问题.

#### 4 相互作用量子系统的物理控制过程 (Physical control process of interaction quantum system)

与周围很好隔离的、含有核自旋的原子(离子)的线性链状排列的固体是典型的相互作用量子系统. 我们假定原子链与链之间的任何相互作用都可以忽略不计,考虑的重点放在同一链中最相邻的原子之间的相互作用. 假定固体被置于一个沿  $z$  轴正向的均匀磁场中,那么每个原子的无相互作用的哈密顿量可以写为:  $H_0 i = -\gamma \hbar B_i I_{iz} = -\hbar \omega_0 I_{iz}$ .

假定现有一个链中含有3种类型的原子核排列成  $ABCABCABC \dots$ . 这3种类型的原子核均有相同的自旋  $I = 1/2$ , 不过它们都有着不同的运动. 假定同一链中自旋之间的相互作用(例如耦极子的相互作用)与外部磁场的相互作用相比较小,此时,我们仅考虑同一链中相邻原子之间  $zz$  部分的相互作用:  $2\hbar J_{i,i+1} I_{iz} I_{(i+1)z}$  (Ising 相互作用). 它改变了系统无相互作用的哈密顿量. 此时整个系统的无外部磁场作用的哈密顿量为

$$H = -\hbar \sum_i (\omega_i I_{iz} + 2J_{i,i+1} I_{iz} I_{(i+1)z}). \quad (17)$$

考虑到链中所有不同的自旋情况,我们取

$$\begin{cases} \omega_1 = \omega_4 = \dots = \omega_A; \\ \omega_2 = \omega_5 = \dots = \omega_B; \\ \omega_3 = \omega_6 = \dots = \omega_C. \end{cases} \quad (18)$$

同样式(17)中的系数  $J_{i,i+1}$  也为  $i$  的周期函数

$$\begin{cases} J_{12} = J_{45} = \dots = J_{AB}; \\ J_{23} = J_{56} = \dots = J_{BC}; \\ J_{34} = J_{67} = \dots = J_{CA}. \end{cases} \quad (19)$$

式(17)中的哈密顿算符没有非对角线项,表明哈密顿算符的本征态代表了自旋状态的类型,比如:  $|00111011\dots\rangle$ . 所以,本征态中的某些“上升”(处于

基态  $|0\rangle$ ), 而其余的态“下降”(处于激发态  $|1\rangle$ ). 假定自旋量子系统的某一状态,例如  $B$  “上升”时,而该系统的另一自旋体  $A$  处于“下降”,并且其他自旋体的状态均不变化,那么在这两种状态下的能量差别为

$$\Delta E = \hbar(\omega_B \pm J_{AB} \pm J_{BC}). \quad (20)$$

式(20)中  $J_{AB}$  前面的“+”号表示对应着与  $B$  相邻的自旋体  $A$  处于基态  $|1\rangle$ ; “-”号则对应与  $B$  相邻的自旋体  $A$  处于激发态  $|1\rangle$ . 对于  $J_{BC}$  前面的“+”, “-”号的含义同  $J_{AB}$ . 由此对式(17)所描述的哈密顿可以获得以下特征频率<sup>[3]</sup>:

$$\begin{cases} \omega_B^{00} = \omega_B + J_{AB} + J_{AC}, \\ \omega_B^{01} = \omega_B + J_{AB} - J_{AC}, \\ \omega_B^{10} = \omega_B - J_{AB} + J_{AC}, \\ \omega_B^{11} = \omega_B - J_{AB} - J_{AC}. \end{cases} \quad (21)$$

该特征频率即为实现相应的状态转变必须人为外部施加的磁场脉冲频率,其中  $\omega_B^{00}$  表示当  $B$  类自旋在其左侧  $A$  和其右侧  $C$  均处于基态  $|0\rangle$  时,  $B$  类状态由  $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$  转换时需要施加的磁场脉冲频率,即对应于  $B$  类状态的转变,在式(21)中所表示的  $\omega_B^j$  意味着当左侧相邻自旋体  $A$  处于  $|i\rangle$  态,而右侧相邻自旋  $C$  处于  $|j\rangle$  态,  $i, j = 0$  或  $1$  时所需要施加的磁场脉冲频率.  $\omega_A^j$  和  $\omega_C^j$  的表达式类似于式(21),只需要将式(21)中的  $B$  换成  $A$  或  $C$  即可. 例如,链中最左端的自旋体为  $A$ ,则  $A$  状态转换的特征频率为

$$\omega_A^{00} = \omega_A + J_{AB}; \quad \omega_A^{01} = \omega_A - J_{AB}. \quad (22)$$

式(22)中  $\omega_A^{0i}$  意味着与  $A$  右侧相邻的自旋体  $B$  处于状态  $|i\rangle$ . 由于边界自旋体为  $A$  (最左端)或处于最右端(假定是  $C$ )的特殊情况,我们可以列出3种情况下(最左端、中间和最右端),对应于每个自旋体转换的所有16个特征频率:

$$A \text{ 类自旋: } \begin{cases} |0\rangle \rightarrow |1\rangle : \omega_A^{00} & \omega_A^{01} \\ |1\rangle \rightarrow |0\rangle : \omega_A^{10} & \omega_A^{11} \end{cases} \quad (23a)$$

$$B \text{ 类自旋: } \begin{cases} |0\rangle \rightarrow |1\rangle : \omega_B^{00} & \omega_B^{01} & \omega_B^{10} & \omega_B^{11} \\ |1\rangle \rightarrow |0\rangle : -\omega_B^{00} & -\omega_B^{01} & -\omega_B^{10} & -\omega_B^{11} \end{cases} \quad (23b)$$

$$C \text{ 类自旋: } \begin{cases} |0\rangle \rightarrow |1\rangle : \omega_C^{00} & \omega_C^{01} \\ |1\rangle \rightarrow |0\rangle : \omega_C^{10} & \omega_C^{11} \end{cases} \quad (23c)$$

在此我们仅考虑对相互作用自旋1/2量子系统的两个本征态  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  之间的转换控制,不考虑叠加态和纠缠态,因此状态的相角对我们来说是不重要的. 控制一个相互作用量子系统的第一个所要解

决的问题是如何控制(操纵)一个给定的量子位. 可以使用一个  $\pi$  共振脉冲驱动一个自旋体从状态  $|0\rangle$  转变到状态  $|1\rangle$ , 反之亦然. 但该脉冲会对其他邻近自旋体产生影响, 这个问题由 Lloyd<sup>[4]</sup> 得以解决. Lloyd 建议提供一个特别的  $\pi$  脉冲序列来改变相邻自旋体之间的状态, 例如, 为实现相邻自旋体  $A$  和  $B$  状态的改变, 假定  $A$  处于  $|0\rangle$ ,  $B$  处于  $|1\rangle$ , 希望通过外加共振磁场的控制来操纵  $A$  变为  $|1\rangle$ , 而使  $B$  变为  $|0\rangle$ . 为此可以施加如下的系列脉冲为:

$$\omega_A^{01} \omega_A^{11} \omega_B^{10} \omega_B^{11} \omega_A^{01} \omega_A^{11} \quad (24)$$

式(24)中各  $\omega$  的表达含义见式(23). 由式(24)所给出的序列脉冲的作用效果见表1.

表1 序列脉冲的作用及其效果

Table 1 The function and effect of sequence pulse

| 初始状态     | $\omega_A^{01} \omega_A^{11}$ 作用后 | $\omega_B^{10} \omega_B^{11}$ 作用后 | $\omega_A^{01} \omega_A^{11}$ 作用后 |
|----------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| $AB$     | $AB$                              | $AB$                              | $AB$                              |
| $A^*B$   | $A^*B$                            | $A^*B^*$                          | $AB^*$                            |
| $AB^*$   | $A^*B^*$                          | $A^*B$                            | $A^*B$                            |
| $A^*B^*$ | $AB^*$                            | $AB^*$                            | $A^*B^*$                          |

表1中符号“\*”表示该自旋体处于  $|1\rangle$  态, 例如  $AB^* = |0\rangle|1\rangle$ . 从表1中可以看出, 在第1对脉冲  $\omega_A^{01} \omega_A^{11}$  作用后, 当  $A$  的右侧  $B$  处于激发态  $B^*$  时,  $A$  的状态改变, 即  $A \leftrightarrow A^*$  (条件是同时存在  $B^*$ ); 若  $A$  右侧  $B$  处于基态  $B$ , 自旋体  $A$  的状态保持不变. 在第2对脉冲  $\omega_B^{10} \omega_B^{11}$  作用后, 其结果为: 若  $B$  左侧的  $A$  处于激发态  $A^*$ , 自旋体  $B$  的状态改变:  $B \leftrightarrow B^*$ ; 若  $B$  左侧的  $A$  处于基态  $A$ , 自旋体  $B$  的状态保持不变. 在第3对脉冲  $\omega_A^{01} \omega_A^{11}$  作用后, 自旋体  $A$  状态的变换规律与第一对脉冲作用结果相同. 由此我们可以看出, 通过施加一个序列脉冲, 我们得到了相邻一对自旋体  $A$  和  $B$  状态的相互转换. 类似地可以通过施加一组象式(24)所述的脉冲序列, 实现一个原子链状态的转换来达到记录信息的目的. 以含有6个自旋体  $ABCABC$  为例, 我们想把数字7下载到此自旋链中, 即让该自旋链纪录“7”这个信息, 使自旋链量子状态从  $ABCABC$  转换到  $ABCA^*B^*C^*$ , 实现从  $|0_A 0_B 0_C 0_A 0_B 0_C\rangle \rightarrow |0_A 0_B 0_C 1_A 1_B 1_C\rangle$  的转换. 为此所需施加的  $\pi$  脉冲序列, 以及作用后所对应的量子系统状态的转换过程如下:

- 1)  $\omega_C^{00}: ABCABC \rightarrow ABCABC^*,$
- 2)  $\omega_B^{01}: ABCABC^* \rightarrow ABCAB^*C^*,$
- 3)  $\omega_A^{01}: ABCAB^*C^* \rightarrow ABCA^*B^*C^*.$

显然, 数字控制非门(CNOT)可以通过施加一组类似于式(24)所描述的脉冲来实现. 例如施加两个具有频率  $\omega_A^{10}$  和  $\omega_A^{11}$  的  $\pi$  脉冲, 则使自旋体  $A$  的状态发生转换当且仅当在其左侧的自旋体  $B$  处于激发态  $B^*$ , 即  $A$  为目标字节,  $B$  为控制字节.

由此可见, 对量子系统状态的控制, 从粒子之间的相互作用以及物理可实现的角度来看, 就是寻找一组达到期望状态变换的、可实现的脉冲序列. 这个问题从控制的角度来看就变成: 通过对薛定谔方程的求解, 可以得到解的一般形式  $\varphi(t) = U(t)\varphi(0)$ , 当初始状态  $\varphi(0)$  和终态  $\varphi(t_f)$  已知时, 如何对所得到的期望么正演化矩阵  $U(t)$  进行分解, 使之成为一组可物理操作的脉冲序列. 系统状态控制的问题是要根据薛定谔方程来进行的. 对么正演化矩阵  $U(t)$  的分解必须根据薛定谔方程的具体形式在李群的特殊么正群中进行. 有关这个问题我们将另文专门研究.

## 5 小结(Conclusions)

本文建立了两个具有相互作用的自旋  $1/2$  粒子系统的数学模型, 在充分考虑量子系统的控制策略可能需要的几何控制的基础上, 建立了一个变量在李群的  $SU(4)$  上变化的系统模型, 并对相互作用的量子系统的控制原理进行了描述, 给出简单的操纵状态变换的物理实现的过程, 指出对量子系统控制的求解, 在期望状态已知的情况下, 等价于求解一组可实现的脉冲序列或等价于对么正演化矩阵的分解. 所以本文的关于具有相互作用的量子系统模型的建立, 为进一步对量子系统的有关可控性、操纵以及反馈控制做好了准备工作.

## 参考文献(References):

- [1] 丛爽. 量子系统控制中状态模型的建立[J]. 控制与决策, 2004, 19(10): 1105-1108.  
(CONG Shuang. Establishment of state space model in quantum system control[J]. Control and Decision, 2004, 19(10): 1105-1108.)
- [2] D'ALESSANDRO D. Control of One and Two Homonuclear Spins [EB/OL]. arXiv: quant-ph/0106127v2 25 Jun 2001.
- [3] GENNARLY P, BERMAN, GARY D. DOOLEN Introduction to Quantum Computers [M]. Singapore: World Scientific Publishing, 1998.
- [4] LLOYD S. Quantum-mechanical computers[J]. Scientific American, 1998, 274(4): 140-145.

## 作者简介:

丛爽 (1961—), 女, 博士, 教授, 博士生导师, 现主要从事人工神经网络, 模糊神经网络, 运动控制, 智能控制, 量子系统控制等方向的研究, E-mail: scony@ustc.edu.cn.