Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова

На правах рукописи

Лазарев Илья Дмитриевич

Многочастичная запутанность в многоквантовой спектроскопии ЯМР в твердом теле

1.3.8 Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва, 2022 г.

Работа выполнена в *лаборатории спиновой динамики и спинового компьютинга* института проблем химической физики РАН

Научный руководитель:	профессор, д.ф.-м.н. *Фельдман Эдуард Беньяминович*
Официальные оппоненты:	профессор, д.ф.-м.н. *Ацаркин Вадим Александрович* ФГБУН институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, главный научный сотрудник лаборатории исследования свойств магнитных и оптических микро- и наноструктур
	д.ф.-м.н. *Лундин Андрей Арнольдович* ФГБУН ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической химической физики
	д.ф.-м.н. *Погосов Вальтер Валентинович* ФГУП Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, начальник лаборатории физики микро- и наноструктур

Защита диссертации состоится «8» декабря 2022 г. в 17:00 часов на заседании диссертационного совета МГУ.013.3(01.01) Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова по адресу: г. Москва, Ленинские горы, д.1 стр. 2, физический факультет, ауд. ЦФА

E-mail: malyshkinaia@my.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на сайте ИАС «ИСТИНА»: `https://istina.msu.ru/dissertations/501405688`

Автореферат разослан « » ноября 2022 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук И.А. Малышкина

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Квантовые корреляции ответственны за преимущества квантовых приборов и устройств над их классическими аналогами. Такие корреляции отсутствуют в классической физике. Изучение их свойств и методов управления ими является теоретической основой квантовых технологий.

Традиционно такие корреляции связывают с понятием запутанности [1], но в квантовой теории информации существует и более общий класс квантовых корреляций — квантовый дискорд [2]. Квантовый дискорд отличен от нуля [3] даже в отсутствии запутанности и при высоких температурах, тем не менее основным ресурсом квантовой информатики [4], квантовой криптографии [5], метрологии [6] и коммуникации [7] является запутанность. Изучение этого ресурса — одна из актуальнейших проблем квантовой теории информации [8]. Предпринятые в данной работе попытки количественного определения многочастичной запутанности мотивированы желанием понять и количественно оценить эти ресурсы.

С фундаментальной точки зрения большой интерес вызывают квантовые процессы, протекающие в системах многих взаимодействующих частиц, например, термализация [9], скремблирование [10], локализация [11]. Являясь характерной особенностью квантовой механики [12], запутанность оказывается [13–15] ключевой особенностью этих процессов. Дальнейшее исследование таких процессов требует развития экспериментальных методов исследования многочастичной запутанности. До недавнего времени исследования [16] были ограничены изучением запутанности и квантового дискорда между двумя подсистемами и направлены на определение мер этих величин. Вместе с тем более существенны не меры квантовых корреляций, а сам факт их наличия. В последние годы возникли [15] методы исследования многочастичной запутанности. В частности, оказалось, что в рамках многоквантовой (МК) спектроскопии ЯМР в твердом теле можно существенно продвинуться в этом направлении.

МК спектроскопия ЯМР [17] уже много лет известна как эффективный метод изучения корреляций многих взаимодействующих частиц, так как на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР [17] создаются многоспиновые коррелированные кластеры. В работах [18–21] были исследованы процессы роста таких коррелированных кластеров и зависимости времени декогеренции от их размера. Также была отмечена связь запутанности с эволюцией МК когерентностей [22, 23], а в работах [24, 25] были введены свидетели двухчастичной запутанности. Позднее метод МК ЯМР был применен для исследования эффекта локализации [26].

В недавней работе Гарттнер и др. показали [15], что специфический класс корреляторов, первоначально разработанных в рамках МК спектроскопии ЯМР [17], является полезным свидетелем многочастичной запутанности. Спектр интенсивностей МК когерентностей ЯМР, детектируемый по окончанию МК эксперимента ЯМР [17], позволяет оценивать величину квантовой информации Фишера, которая, в свою очередь, связана [27] с количеством запутанных частиц в системе.

Существуют и другие методы детектирования [28] многочастичной запутанности. В частности, критерий на основе энтропии Реньи [10, 29] является строгим свидетелем многочастичной запутанности для чистых состояний. Энтропия Реньи может быть измерена экспериментально, но для этого требуются ресурсы, которые экспоненциально масштабируются с размером изучаемой системы, а также возможность одночастичной адресации. Развиваемый в данной работе критерий многочастичной запутанности на основе МК спектра ЯМР также является экспериментально доступным [17] свидетелем запутанности, но менее требовательным к ресурсам, а также применимым как к открытым, так и к изолированным квантовым системам.

Целью данной работы является теоретическое исследование многочастичной запутанности в системах с большим количеством частиц ($>$200) в рамках МК спектроскопии ЯМР, а также развитие методов экспериментального измерения величин квантовой информации Фишера и косой информации Вигнера-Янасе.

Объектом исследования являются системы взаимодействующих ядерных спинов $\frac{1}{2}$ при низких температурах. В качестве таких систем рассматриваются тонкая пленка, содержащая нанопоры, заполнения спиннесущими частицами [30], зигзагообразные цепочки протонов в кристалле гамбергита [31] и цепочки ядер фтора в кристалле фтористого апатита кальция [32]. **Предметом исследования** является запутанность возникающая в таких системах в МК эксперименте ЯМР, а также теория методов измерения квантовых информационных величин.

Научная новизна. В данной работе была разработана теория МК ЯМР для нанопоры при произвольной температуре, что позволило впервые теоретически исследовать температурную зависимость многочастичной запутанности в системе из более чем 200 взаимодействующих частиц. Также в данной работе был разработан метод определения величины косой информации Вигнера-Янасе в МК эксперименте ЯМР.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Разработанная теория МК ЯМР позволяет исследовать многочастичную запутанность в системе ядерных спинов при произвольной

температуре.

2. С понижением температуры количество запутанных спинов растет и в нанопоре, и в зигзагобразной цепочке.

3. Оценка количества запутанных спинов в однородных цепочках согласуется с результатами, представленными в литературе.

4. Если спиновая система исследуется в МК эксперименте ЯМР с начальным равновесным термодинамическим состоянием при температуре T, то ее косая информация Вигнера-Янасе равна удвоенному второму моменту распределения интенсивностей МК когерентностей ЯМР системы, приготовленной при вдвое большей температуре $2T$ в тот же момент времени эволюции;

5. Результаты оценки количества запутанных спинов, полученные на основе квантовой информации Фишера и косой информации Вигнера-Янасе, согласуются;

Практическая ценность. Так как косая информация Вигнера-Янасе нашла много применений в квантовой теории информации, предлагаемый в данной работе метод экспериментального определения ее величины не только позволяет исследовать многочастичную запутанность методами МК ЯМР, но и открывает возможность решения широкого класса задач в этой области.

Публикации и апробация работы. Все результаты, представленные в диссертации, опубликованы в высокорейтинговых зарубежных и российских научных журналах (Physical Review A, 2019; Journal of Magnetic Resonance, 2020; Журнал экспериментальной и теоретической физики, 2020; Applied Magnetic Resonance, 2020; Physics Letters A, 2021) и представлены на пяти международных и одной всероссийской конференциях.

Личный вклад. Представленные в работе результаты получены автором лично или при его непосредственном участии совместно с соавторами опубликованных работ. Постановка цели и задач, выбор методов их решения и интерпретация полученных результатов выполнены совместно с научным руководителем.

Структура и объём диссертации. Диссертация включает в себя введение, пять глав, заключение и основные выводы, благодарности, список опубликованных работ и библиографический список использованной литературы, состоящий из 171 наименования. Работа изложена на 95 страницах, содержит 1 таблицу и 37 рисунков.

Краткое содержание диссертации

Во введении дана общая характеристика диссертационной работы, обоснована актуальность темы, сформулированы цели работы, показана новизна работы.

Первая глава носит обзорный характер и посвящена роли многочастичной запутанности в квантовой теории информации и методам ее детектирования. Отмечается, что исследование запутанности между двумя подсистемами хорошо изучено как теоретически, так и экспериментально [33], в отличие от запутанности многих частиц. В этой главе вводится определение k-частично запутанных состояний на основе классификации из работ [34–36]. Чистое состояние N частиц является k-частино запутанным, если

$$|\Psi_{k-\mathrm{ent}}\rangle = \otimes_{i=1}^{\mathrm{M}} |\Psi_i\rangle\,, \tag{1}$$

где $|\Psi_i\rangle$ — многокубитное несепарабельное или однокубитное состояние подсистемы с N_i частицами $\left(\sum_{i=1}^{N} N_i = N\right)$, и существует такое $m \in \mathbb{N}$, что $N_m \geq k$. Смешанное состояние $\rho_{k-\mathrm{ent}}$ может быть представлено как

$$\rho_{k-\mathrm{ent}} = \sum_l p_l\, |\Psi_{k_l-\mathrm{ent}}\rangle \langle \Psi_{k_l-\mathrm{ent}}|\,, \tag{2}$$

и существует такое l, что $k_l \geq k$.

Также в этой главе дается обзор методов детектирования многочастичной запутанности. Особенное внимание уделяется методу оценки количества запутанных частиц в квантовой системе с помощью квантовых информационных величин. В частности, в этой главе демонстрируется, что если квантовая информация Фишера системы N частиц с матрицей плотности ρ

$$F_{\mathrm{Q}}(\rho) > \left[\frac{N}{k}\right] k^2 + \left(N - k\left[\frac{N}{k}\right]\right)^2, \tag{3}$$

то ρ — $(k+1)$-частично запутанное состояние [37]. Этот результат, вытекающий из общих свойств квантовой информации, справедлив [35] и для косой информации Вигнера-Янасе.

Так как дальнейшее исследование многочастичной запутанности требует развитие экспериментальных методов, в этой главе приводится вывод результата, полученного в работе [15], который открывает возможность экспериментального определения нижней границы квантовой информации Фишера в МК эксперименте ЯМР.

Также в этой главе даются краткий обзор МК эксперимента ЯМР и примеры образцов, подходящих для исследования многочастичной запутанности в рамках МК спектроскопии ЯМР.

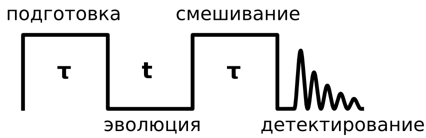


Рис. 1: Схема МК эксперимента ЯМР.

Во второй главе разрабатывается теория МК эксперимента ЯМР для низких температур. Температура учитывается в начальном термодинамическом равновесном состоянии системы $\rho_{\rm eq}$, которое определяется выражением

$$\rho_{\rm eq} = \frac{e^{\beta I_{\rm z}}}{Z}, \quad \beta = \frac{\hbar\omega_0}{kT}, \tag{4}$$

где $Z = \mathrm{Tr}\left\{e^{\beta I_{\rm z}}\right\}$ — статистическая сумма, $\hbar$ и k — постоянная Планка и постоянная Больцмана соответсвенно, ω_0 — ларморовская частота, T — температура, и I_z — оператор проекции полного углового момента на ось z, которая направлена вдоль сильного внешнего магнитного поля. В данной главе предлагается такое обобщение МК эксперимента ЯМР, сигнал которого удовлетворяет специальной форме [15] при любых температурах. Для этого необходимо по прошествии трех периодов МК эксперимента ЯМР (см. Рис. 1) провести усреднение по начальному состоянию. В этом случае коррелятор сигнала имеет вид

$$G_{\rm LT}(\tau,\phi) = \mathrm{Tr}\left\{e^{i\phi I_{\rm z}}\rho_{\rm LT}(\tau)e^{-i\phi I_{\rm z}}\rho_{\rm LT}(\tau)\right\}, \tag{5}$$

где $\rho_{\rm LT}(\tau)$ — решение уравнения Лиувилля

$$i\frac{d\rho}{d\tau} = [H_{\rm MQ}, \rho(\tau)] \tag{6}$$

с начальной матрицей плотности $\rho_{\rm eq}$ (4). Так как матрицу плотности можно представить [38] в виде ряда

$$\rho_{\rm LT}(\tau) = \sum_n \rho_{\rm LT}^{(n)}(\tau), \tag{7}$$

где $\rho_{\mathrm{LT}}^{(n)}$ вклад в МК когерентность порядка n, учитывая коммутационное соотношение $[I_{\mathrm{z}}, \rho_{\mathrm{LT}}(\tau)] = n\rho_{\mathrm{LT}}^{(n)}(\tau)$, сигнал $G_{\mathrm{LT}}(\tau, \phi)$ может быть приведен к виду

$$G_{\mathrm{LT}} = \sum_n e^{in\phi} \mathrm{Tr}\left\{\rho_{\mathrm{LT}}^{(n)}(\tau)\rho_{\mathrm{LT}}^{(-n)}(\tau)\right\}. \quad (8)$$

Коррелятор сигнала (5) обобщенного МК эксперимента ЯМР является неупорядоченным по времени коррелятором, и, следовательно, удвоенный второй момент (дисперсия) $M_2(\tau)$ распределения интенсивностей МК когерентностей ЯМР является, [15] нижней границей квантовой информации Фишера F_Q:

$$F_Q(\tau) \geq 2M_2(\tau) = 2\sum_n n^2 J_{\mathrm{LT}}^{(n)}(\tau), \quad (9)$$

где

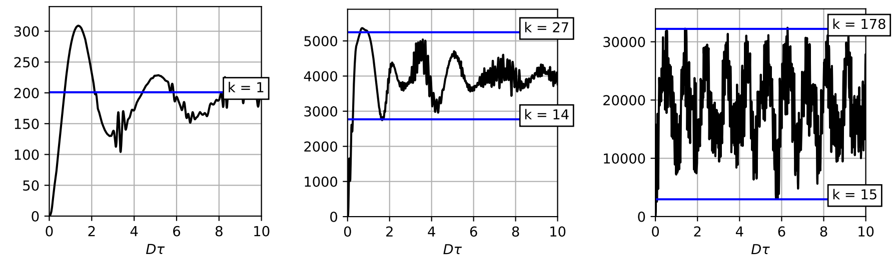
$$J_{\mathrm{LT}}^{(n)} = \mathrm{Tr}\left\{\rho_{\mathrm{LT}}^{(n)}(\tau)\rho_{\mathrm{LT}}^{(-n)}(\tau)\right\}. \quad (10)$$

В третьей главе исследуется температурная зависимость многочастичной запутанности, возникающей в нанаполости с большим количеством частиц ($N \approx 50 \ldots 200$) на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР (см. Рис. 1). В качестве модели рассматривается несферическая нанопора, заполненная частицами со спином $\frac{1}{2}$ (например, ксеноном) в сильном внешнем магнитном поле [30]. В процессе молекулярной диффузии константа ДДВ усредняется до некоторого ненулевого значения D_{es}, которое зависит от формы полости, давления газа и направления сильного внешнего магнитного поля. По существу нанопора является системой эквивалентных спинов, и ее МК динамика ЯМР может быть исследована точно.

На подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР гамильтониан системы эквивалентных спинов определяется выражением

$$H_{\mathrm{MQ,es}} = -\frac{D_{\mathrm{es}}}{4}\left(\left(I^+\right)^2 + \left(I^-\right)^2\right), \quad I^\pm = \sum_{j=1}^{N} I_j^\pm \quad (11)$$

где I_j^+ и I_j^- — повышающий и понижающий операторы спина j, N — число спинов в нанопоре, D_{es} — константа ДДВ, усредненная по быстрой молекулярной диффузии спин-несущих частиц в нанопоре. Так как гамильтониан $H_{\mathrm{MQ,es}}$ коммутирует с квадратом полного спинового углового момента I^2 ($\left[H_{\mathrm{MQ,es}}, I^2\right] = 0$), он может быть разбит на блоки



(a) $\beta = 0.1$. Выше горизонтальной линии детектируется только парная запутанность.

(b) $\beta = 0.5$. В полосе, ограниченной горизонтальными линиями ($k = 14$ и $k = 27$), детектируется запутанность от 15 до 27 спинов.

(c) $\beta = 3.5$. Детектируется запутанность почти всех спинов (179 из 201).

Рис. 2: Зависимость нижней границы квантовой информации Фишера $F_Q = 2M_2(\tau)$ от безразмерного времени $D_{\rm es}\tau$ с термодинамическим равновесным начальным состоянием $\rho_{\rm eq}$ системы с $N = 201$ частиц.

$H^S_{\rm MQ,es}$, соответствующие различным значениям S полного спинового углового момента

$$S = \frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2} - 2, \ldots, \frac{N}{2} - \left[\frac{N}{2}\right], \tag{12}$$

где $[x]$ — целая часть x. Когда начальное состояние системы $\rho(0)$ тоже коммутирует с квадратом полного спинового углового момента I^2 ($\left[\rho(0), I^2\right] = 0$), можно перейти к рассмотрению динамики отдельных блоков $\rho^S(0)$, размер которых равен $2S + 1$, а степень вырождения $n(S, N)$ равна [39]

$$n(S, N) = \frac{N!(2S + 1)}{\left(\frac{N}{2} + S + 1\right)! \left(\frac{N}{2} - S\right)!}. \tag{13}$$

В этом случае выражение для МК когерентности, наблюдаемой в обобщенном МК эксперименте ЯМР, может быть записано в виде

$$J^{(n)}(\tau) = \sum_S n(S, N) J^{(n),S}(\tau), \quad (-N \le n \le N), \tag{14}$$

где

$$J^{(n),S} = \mathrm{Tr}\left\{\rho^{(n),S}(\tau)\rho^{(-n),S}(\tau)\right\}, \tag{15}$$

а $\rho^{(n),S}(\tau)$ — эволюционная матрица плотности соответсвующая блоку S.

Термодинамическая равновесная матрица плотности ρ_{eq}, определенная в выражении (4), коммутирует с квадратом полного углового момента ($\left[\rho_{\mathrm{eq}}, I^2\right] = 0$). Поскольку гамильтониан $H_{\mathrm{MQ,es}}$ и матрица плотности в начальный момент времени $\rho(0) = \rho_{\mathrm{eq}}$ могут быть приведены к блочно диагональному виду, можно численно рассчитать эволюцию каждого блока ρ^S_{eq}. Так как гамильтониан $H_{\mathrm{MQ,es}}$ не зависит от времени, уравнение Лиувилля для блока $\rho^S_{\mathrm{LT}}(\tau)$ эволюционной матрицы плотности имеет вид

$$\rho^S_{\mathrm{LT}}(\tau) = e^{-iH^S_{\mathrm{MQ,es}}\tau} \rho^S_{\mathrm{eq}} e^{iH^S_{\mathrm{MQ,es}}\tau}. \qquad (16)$$

Подставляя выражение (16) в (15) и (14), получаем интенсивности МК когерентностей ЯМР, второй момент распределения которых определяет (9) нижнюю границу информации Фишера.

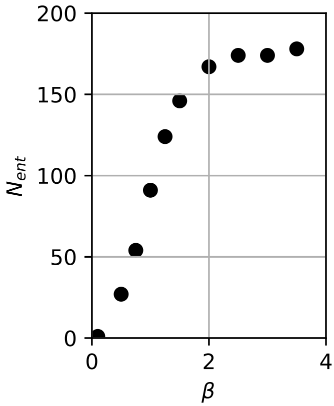


Рис. 3: Зависимость максимального числа запутанных спинов от обратной температуры $\beta = \frac{\hbar\omega_0}{kT}$.

В этой главе диссертации приводится аналитическое решение для системы из $N = 3$ частиц. В этом случае возникают когерентности только нулевого и плюс/минус второго порядков. Полученные выражения для нормированных интенсивностей имеют вид

$$J_{\mathrm{LT},0}(\tau) = 1 - \frac{1}{2}\tanh^2(\beta)\sin^2\left(\sqrt{3}D_{\mathrm{es}}\tau\right), \qquad (17)$$

$$J_{\mathrm{LT},\pm 2}(\tau) = \frac{1}{4}\tanh^2(\beta)\sin^2\left(\sqrt{3}D_{\mathrm{es}}\tau\right). \qquad (18)$$

Результаты численных расчетов зависимости нижней границы информации Фишера от времени для системы с $N = 201$ частиц приведены на Рис. 2.

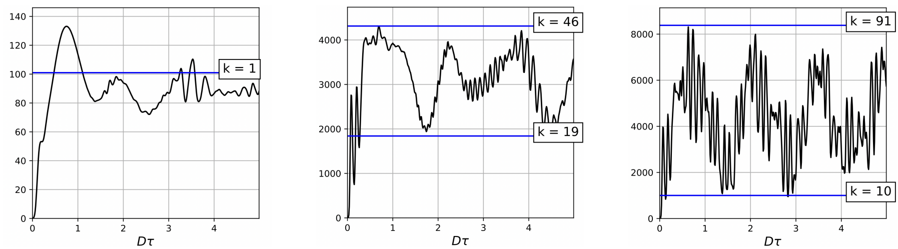
На Рис. 2a значение параметра $\beta = 0.1$ соответствует температуре $T = 2.4 \cdot 10^{-1}$ K при ларморовской частоте $\omega_0 = 2\pi \cdot 500 \cdot 10^6$ с$^{-1}$. Неравенство (3) может быть выполнено только при $k = 1$ (горизонтальная линия на Рис. 2a). Это подтверждает, что в высокотемпературном случае возможна парная запутанность [25].

При температуре $T = 4.8 \cdot 10^{-2}$ K ($\beta = 0.5$) на Рис. 2b видна полоса, в которой неравенство (3) может быть удовлетворено, когда $14 \leq k < 27$.

При понижении температуры ширина полосы, где детектируется многочастичная запутанность, увеличивается. При температуре $T = 6.856 \cdot 10^{-3}$ К ($\beta = 3.5$) почти все спины (до 179 из 201) запутаны (см. Рис. 2c). Запутанность существует в течение всего процесса эволюции, за исключением короткого начального периода времени.

На Рис.3 точками представлено максимальное значение запутанности за период ($0 \leq D_{\rm es}\tau \leq 10$) при различных значениях обратной температуры β. Количество запутанных спинов увеличивается при понижении температуры.

Многочастичную запутанность также можно исследовать, когда та же самая система первоначально приготовлена в дипольном упорядоченном состоянии [40]. В работе [41] отмечается, что в этом случае МК когерентности ЯМР возникают быстрее.



(a) $T = 6 \cdot 10^{-4}$ К. Выше горизонтальной линии детектируется только парная запутанность.

(b) $T = 3.2 \cdot 10^{-4}$ К. В полосе, ограниченной горизонтальными линиями ($k = 19$ и $k = 46$), детектируется запутанность от 20 до 46 спинов.

(c) $T = 4.8 \cdot 10^{-5}$ К. В полосе, ограниченной горизонтальными линиями ($k = 10$ и $k = 91$), детектируется запутанность от 11 до 91 спинов.

Рис. 4: Зависимость нижней границы квантовой информации Фишера $F_Q = 2M_2(\tau)$ от безразмерного времени $D_{\rm es}\tau$ с дипольным упорядоченным начальным состоянием $\rho_{\rm do}$ системы с $N = 101$ частиц.

В общем случае в начальный момент времени система находится в термодинамическом равновесии с матрицей плотности

$$\rho(0) = \bar{\rho}_{\rm eq} = \frac{1}{\bar{Z}} e^{\frac{\hbar\omega_0}{k}\alpha_{\rm z} I_{\rm z} + \frac{\hbar}{k}\beta_{\rm d} H_{\rm dz}}, \qquad (19)$$

где $\bar{Z} = \mathrm{Tr}\left\{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k}\alpha_{\rm z} I_{\rm z} + \frac{\hbar}{k}\beta_{\rm d} H_{\rm dz}}\right\}$ — статистическая сумма, $\hbar$ и k — константы Планка и Больцмана, ω_0 — частота Лармора, $I_{\rm z}$ — оператор проекции полного углового спинового момента на ось z, который направлен вдоль сильного внешнего магнитного поля, H_{dz} — секулярная часть гамильтониана ДДВ в сильном внешнем магнитном поле и α_{z}, β_{d} — обратные зеемановская и дипольная температуры. Используя метод адиабатического размагничивания во вращающейся системе координат (ВСК) [40, 42] либо двухимпульсную последовательность Брокаерта-Джинера, можно получить систему в состоянии термодинамического равновесия с матрицей плотности

$$\rho_{\mathrm{do}} = \frac{1}{Z_{\mathrm{do}}} e^{\frac{\hbar \beta_{\mathrm{d}} H_{\mathrm{dz}}}{k}}, \tag{20}$$

где статистическая сумма $Z_{\mathrm{do}} = \mathrm{Tr}\left\{ e^{\frac{\hbar \beta_{\mathrm{d}} H_{\mathrm{dz}}}{k}} \right\} \approx 2^N$.

Магнитное упорядочение [43] выходит за рамки диссертации, и рассматривается только промежуточный температурный случай, когда зеемановская температура является низкой $\left(\frac{\hbar\omega_0}{k}\alpha_{\mathrm{z}} \gg 1\right)$, а дипольная — высокой $\left(\frac{\hbar D}{k}\beta_{\mathrm{d}} \ll 1\right)$. Тогда выражение (20) матрицы плотности ρ_i может быть разложено в ряд по β_{d}:

$$\rho_{\mathrm{do}} \approx \frac{1}{Z_{\mathrm{do}}} \left(1 + \frac{\hbar \beta_{\mathrm{d}}}{k} H_{\mathrm{dz}} \right). \tag{21}$$

В оригинальной работе [44] двухимпульсный эксперимент Брокаерта-Джинера был разработан для высокотемпературного случая. В этой главе диссертации теоретически показано, что этот эксперимент также может выполняться и для промежуточного температурного случая.

В нанопоре гамильтониан H_{dz} частично усредняется за счет быстрой молекулярной диффузии и может быть записан [41, 45] в виде

$$H_{\mathrm{dz,es}} = \frac{D_{\mathrm{es}}}{2}(3I_{\mathrm{z}}^2 - I^2), \tag{22}$$

где I^2 — квадрат полного спинового углового момента. Таким образом, начальное состояние ρ_{do} (21) может быть разделено на блоки ρ_{do}^S, соответствующие различным значениям S (12) полного спинового углового момента. Эволюция блока ρ_{do}^S определяется уравнением Лиувилля

$$\rho_{\mathrm{do}}^S(\tau) = e^{-iH_{\mathrm{MQ,es}}^S \tau} \rho_{\mathrm{do}}^S e^{iH_{\mathrm{MQ,es}}^S \tau}. \tag{23}$$

Подставляя выражение (23) в (15) и (14), получаем интенсивности МК когерентностей ЯМР.

В этой главе диссертации приводится аналитическое решения для системы из $N = 3$ частиц. В такой системе возникают когерентности только нулевого и плюс/минус второго порядков. Полученные выражение для нормированных интенсивностей имеют вид

$$J_{\mathrm{do},0}(\tau) = 1 - \frac{1}{2}\tanh^2\left(\frac{3\beta^*}{2}\right)\sin^2\left(\sqrt{3}D\tau\right), \tag{24}$$

$$J_{\mathrm{do},\pm 2}(\tau) = \frac{1}{4}\tanh^2\left(\frac{3\beta^*}{2}\right)\sin^2\left(\sqrt{3}Dt\right), \tag{25}$$

где $\beta^* = \frac{\hbar}{k}\beta_{\mathrm{d}} D_{\mathrm{es}}$.

Результаты численных расчетов зависимости нижней границы информации Фишера (9) от времени для системы с $N = 101$ частиц приведены на Рис. 4. Из Рис. 4a видно, что при температуре $T = 6 \cdot 10^{-4}$ K детектируется только парная запутанность. При температуре $T = 3.2 \cdot 10^{-4}$ K на Рис. 4b появляется полоса, в которой неравенство (3) может быть выполнено, когда $19 \leq k < 46$. Таким образом, детектируется многочастичная запутанность от 20 до 46 спинов. Когда температура понижается, ширина полосы, в которой существует многочастичная запутанность, увеличивается. При температуре $T = 4.8 \cdot 10^{-5}$ K (Рис. 4c) детектируется запутанность почти всех спинов (92 из 101).

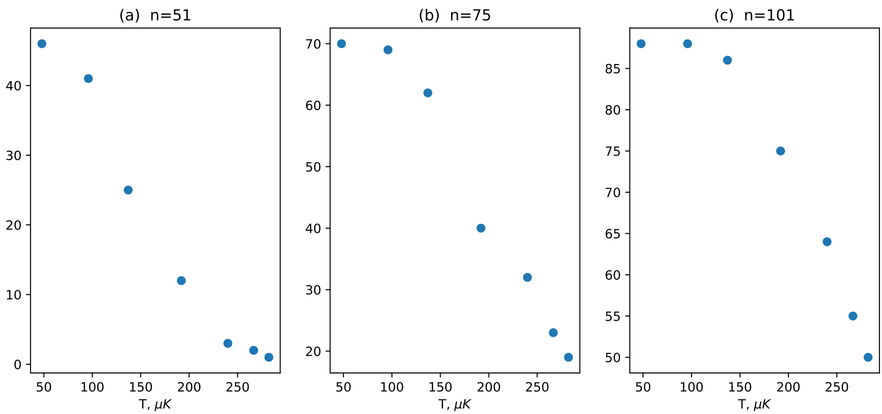


Рис. 5: Зависимость максимального числа запутанных спинов за интервал времени эволюции ($0 \leq D\tau \leq 3$), от температуры при a) $N = 51$; b) $N = 75$; c) $N = 101$.

Зависимость максимального размера запутанного кластера за время эволюции ($0 \leq \mathrm{D}\tau \leq 3$) от температуры при разных числах спинов в нанопоре представлена на Рис. 5. Максимальное количество запутанных спинов уменьшается при повышении температуры. Максимальное количество запутанных спинов увеличивается, когда увеличивается число спинов в нанопоре, потому что система в нанопоре становится плотнее.

В четвертой главе исследуется многочастичная запутанность в цепочках ядерных спинов.

Однородная цепочка является наиболее простой и хорошо изученной разновидностью одномерной системы. Создание запутанных кластеров в таких цепочках ограничено слабыми ДДВ удаленных спинов. В МК эксперименте ЯМР в однородной цепочке существенны только когерентности нулевого и плюс/минус второго порядков. Неравенство (3) выполняется только для $k = 1$, то есть детектируется только парная запутанность. Полученная оценка согласуется с представленными в литературе [25, 46] результатами. Этого достаточно для передачи МК когерентностей вдоль цепочки [47–50] и создания запутанности между удаленными концами цепочки [51]. В однородных цепочках константа ДДВ ближайших соседей в восемь раз превышает константу ДДВ следующих ближайших соседей. В зигзагообразных цепочках роль следующих ближайших соседей является более существенной, что ведет к необходимости учитывать МК когерентности четвертого порядка [52].

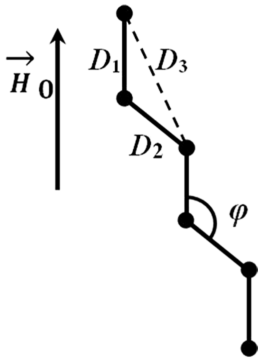


Рис. 6: Схема зигзагообразной цепочки ядерных спинов. Нечетные звенья параллельны внешнему магнитному полю $\vec{H}_0$, а φ — угол между соседними звеньями.

На Рис. 6 схематично представлена зигзагообразная цепочка ядерных спинов в сильном внешнем магнитном поле $\vec{H}_0$. Нечетные звенья цепочки параллельны внешнему магнитному полю $\vec{H}_0$, а φ — угол между соседними звеньями. Гамильтониан, описывающий МК динамику ЯМР зигзагобразной цепочки с учетом взаимодействия со следующими ближайшими соседями, задается выражением [53]

$$H_{\mathrm{MQ,zc}} = \sum_{i=1}^{N-1} D_{i,i+1}(I_i^+ I_{i+1}^+ + I_i^- I_{i+1}^-) + \sum_{i=1}^{N-2} D_{i,i+2}(I_i^+ I_{i+2}^+ + I_i^- I_{i+2}^-), \quad (26)$$

где I_i^+, I_i^- — повышающий и понижающий операторы спинового углового момента ядра с номером i, N — количество ядерных спинов в цепочке.

Константы ДДВ в зигзагообразной цепочке определяются выражениями [43]

$$D_{2n-1,2n} = D_1 = \frac{\gamma^2 \hbar}{r^3}, \tag{27}$$

$$D_{2n,2n+1} = D_2 = \frac{\gamma^2 \hbar}{2r^3} \left(3\cos^2\varphi - 1\right), \quad n = 1, 2\ldots, \tag{28}$$

где γ — гиромагнитное отношение, r — расстояние между ближайшими спинами в цепочке. Также в гамильтониане учитываются взаимодействия со следующими соседями, константа диполь-дипольного взаимодействия которых определяется как [43]

$$D_{n,n+2} = \frac{\gamma^2 \hbar}{16 r^3 \sin^3 \frac{\varphi}{2}} \left(3\sin^2\frac{\varphi}{2} - 1\right). \tag{29}$$

В частности, уравнения (27), (29) означают, что для прямой спиновой цепочки, когда ($\varphi = \pi$), константа дипольной связи для ближайших соседей в восемь раз больше, чем константа дипольной связи между следующими ближайшими соседями. При $\varphi = \frac{2\pi}{3}$ отношение констант связи

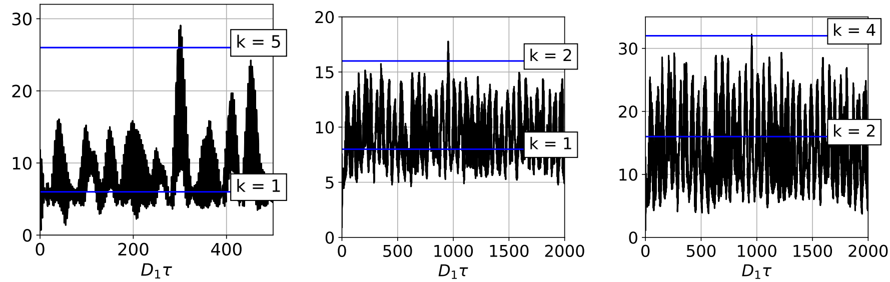
$$\left|\frac{D_{2n,2n+1}}{D_{2n-1,2n+1}}\right| = \frac{3\sqrt{3}}{5}. \tag{30}$$

Следовательно, ДДВ следующих ближайших соседей существенны для МК динамики ЯМР при определённых ориентациях зигзагообразной спиновой цепочки по отношению к направлению внешнего сильного магнитного поля.

Эволюционная матрица плотности зигзагобразной цепочки на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР (Рис. 1) с термодинамическим начальным состоянием ρ_{eq} определяется выражением

$$\rho_{\mathrm{zc}}(\tau) = e^{-iH_{\mathrm{MQ,zc}}\tau} \rho_{\mathrm{eq}} e^{iH_{\mathrm{MQ,zc}}\tau}. \tag{31}$$

Интенсивности МК когерентностей ЯМР определяются уравнением (10), а нижняя граница информации Фишера — из выражения (9). При обратной температуре $\beta = 0.5$, что соответствует температуре $T = 4.8 \times 10^{-2}$ K при ларморовской частоте $\omega_0 = 2\pi \times 500 \times 10^6\,\mathrm{s}^{-1}$, для спиновых цепочек с $N = 6$ и $N = 8$ неравенство (3) выполняется только при $k = 1$. Это означает, что в высокотемпературном случае детектируется только парная запутанность, что согласуется с работой [25].



(a) $\beta = 10$ ($T = 2.4 \times 10^{-3}$ K), $N = 6$. В полосе, ограниченной горизонтальными линиями ($k = 1$ и $k = 5$), детектируется запутанность от 2 до 5 спинов.

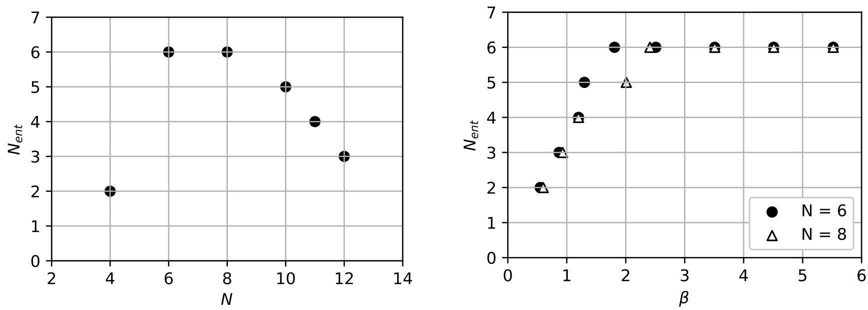
(b) $\beta = 1$ ($T = 2.4 \times 10^{-2}$ K), $N = 8$. В области ограниченной горизонтальными линиями $k = 1$ и $k = 2$ детектируется парная запутанность.

(c) $\beta = 20$ ($T = 1.2 \times 10^{-3}$ K), $N = 8$. В области ограниченной горизонтальными линиями $k = 2$ и $k = 4$ детектируется трехчастичная запутанность.

Рис. 7: Зависимость нижней границы квантовой информации Фишера $F_Q = 2M_2(\tau, \beta)$ от безразмерного времени $D_1\tau$ в зигзагообразной цепочке.

Временная эволюция нижней границы квантовой информации Фишера, соответствующая удвоенному второму моменту распределения интенсивностей МК когерентностей (9) для шестиспиновой цепочки, представлена на Рис. 7a при температуре $T = 2.4 \times 10^{-3}$ K ($b = 10$). На Рис. 7a видна полоса, в которой неравенство (3) удовлетворено при $1 \leqslant k \leqslant 5$. Таким образом, детектируется многочастичная запутанность в спиновых кластерах, состоящих из 2-6 спинов. Зависимость максимального размера запутанного кластера от длины цепи приведена на Рис. 8a при температуре $T = 2.4 \times 10^{-3}$ K.

Временная эволюция нижней границы информации Фишера в восьмиспиновой зигзагообразной цепочке представлена на Рис. 7b и Рис. 7c. При температуре $T = 2.4 \times 10^{-2}$ K возникают многочастичные запутанные кластеры, состоящие из двух или трех спинов, а при температуре $T = 1.2 \times 10^{-2}$ K возникают запутанные кластеры размером от 2 до 4 спинов.



(a) (b)

Рис. 8: Зависимость максимального числа запутанных спинов N_{ent} от a) длины зигзагообразной цепочки N при температуре $\beta = 10$ ($T = 2.4 \times 10^{-3}$ K); b) температуры β в зигзагообразной цепочке, состоящей из шести и восьми спинов.

Зависимость максимального размера запутанного кластера от температуры в зигзагообразной цепочке, состоящей из шести или восьми спинов, приведена на Рис. 8b. Число запутанных спинов увеличивается с понижением температуры. Так же как и в случае системы эквивалентных спинов, при низких температурах почти все спины в цепочке запутанны.

В пятой главе разрабатывается теория экспериментального метода определения косой информации Вигнера-Янасе в рамках МК спектроскопии ЯМР.

Эволюционная матрица плотности произвольной системы на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР (Рис. 1) с начальным термодинамическим равновесным состоянием ρ_{eq} (4) имеет вид

$$\rho(\tau,\beta) = V^{+}(\tau)\rho_{\text{eq}}V(\tau) = V^{+}(\tau)\frac{e^{\beta I_{\text{z}}}}{Z}V(\tau), \tag{32}$$

где $V(\tau) = e^{iH_{\text{MQ}}\tau}$ — оператор эволюции.

Косая информация Вигнера-Янасе по отношению к наблюдаемой I_{z} определяется выражением [54]

$$I_{\text{WY}}\left(\rho(\tau,\beta), I_{\text{z}}\right) = -2\text{Tr}\left\{\left[\sqrt{\rho(\tau,\beta)}, I_{\text{z}}\right]\right\}^{2}. \tag{33}$$

Интригующей особенностью косой информации является наличие корня из матрицы плотности. В рассматриваемом случае корень из матрицы плотности $\rho(\tau,\beta)$ равен

$$\sqrt{\rho(\tau,\beta)} = \sqrt{V^{+}(\tau)\frac{e^{\beta I_{\mathrm{z}}}}{Z}V(\tau)} = V^{+}(\tau)\frac{e^{\frac{\beta}{2}I_{\mathrm{z}}}}{\sqrt{Z}}V(\tau). \tag{34}$$

Из выражения (34) следует, что в действительности можно отказаться от корня в определении (33) косой информации Вигнера-Янасе и перейти к рассмотрению системы при вдвое большей температуре с матрицей плотности $\rho\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right)$. Для анализа вкладов отдельных МК когерентностей ЯМР эволюционную матрицу плотности $\rho(\tau,\frac{\beta}{2})$ можно представить в виде ряда [55]

$$\rho\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right) = \sum_{n}\rho_{n}\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right). \tag{35}$$

Тогда коммутатор в выражении (33) можно переписать как

$$\left[I_{\mathrm{z}},\sqrt{\rho(\tau,\beta)}\right] = \left[I_{\mathrm{z}},\sum_{k}\rho_{k}\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right)\right] = \sum_{k}k\rho_{k}\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right) \tag{36}$$

и

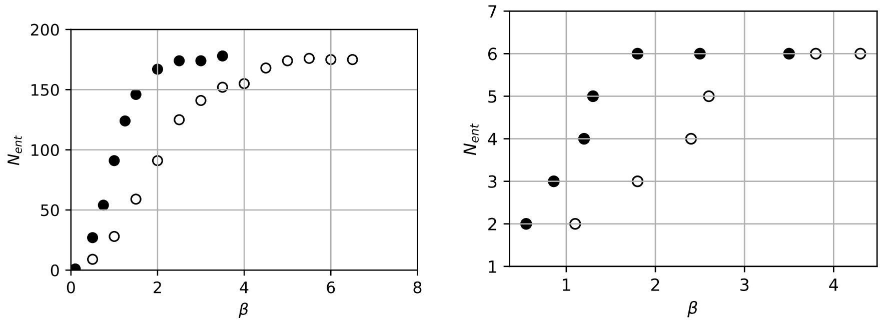
$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\left\{\left[I_{\mathrm{z}},\sqrt{\rho(\tau,\beta)}\right]\right\}^{2} \\ &= \mathrm{Tr}\left\{\sum_{k,k'}kk'\rho_{k}\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right)\rho_{k'}\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right)\right\} \\ &= \sum_{k}k^{2}J_{k}\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right).\end{aligned} \tag{37}$$

Подставляя выражение (37) в выражение (33), получаем выражение для косой информации Вигнера-Янасе через второй момент распределения интенсивностей МК когерентностей ЯМР

$$I_{\mathrm{WY}}\left(\rho(\tau,\beta),I_{\mathrm{z}}\right) = 2\sum_{k}k^{2}J_{k}\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right) = 2M_{2}\left(\tau,\frac{\beta}{2}\right). \tag{38}$$

Таким образом, если спиновая система исследуется при температуре $T\sim\beta^{-1}$, то ее косая информация Вигнера-Янасе равна удвоенному второму моменту распределения интенсивностей МК когерентностей ЯМР системы, приготовленной при вдвое большей температуре $2T\sim 2\beta^{-1}$, в любой момент времени эволюции спиновой системы на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР.

Полученное равенство (38) позволяет экспериментально измерять точное значение косой информации Вигнера-Янасе в МК эксперименте ЯМР, а не нижнюю границу, как в случае с информацей Фишера. В частности, косая информация наравне с квантовой информацией Фишера может быть использована для исследования многочастичной запутанности.



(a) (b)

Рис. 9: Зависимость максимального измеренного числа запутанных спинов N_{ent} от обратной температуры $\beta = \frac{\hbar\omega_0}{kT}$ в a) нанопоре, заполненной спин-несущими частицами; b) зигзагообразной цепочке, состоящей из шести спинов. Черные круги — результаты, полученные на основе квантовой информации Фишера. Белые круги — результаты, полученные на основе косой информации Вигнера-Янасе.

На Рис. 9 представлены результаты зависимости максимального измеренного размера запутанного кластера от обратной температуры β для нанопоры с $N = 201$ и зигзагообразной цепочки с $N = 6$. Оценки числа запутанных спинов были получены на основе рассчитанных значений нижней границы квантовой информации Фишера и точного значения косой информации Вигнера-Янасе. Величины обеих информаций были вычислены через второй момент распределения МК когерентностей ЯМР. Из результатов следует, что косая информация и квантовая информация Фишера дают сравнимые оценки размеров запутанных кластеров. Этот результат также подтверждается двойным неравенством, полученным в работе [56] для квантовой информации Фишера и косой информации Вигнера-Янасе:

$$I_{\mathrm{WY}}\left(\rho(\tau,\beta),I_{\mathrm{z}}\right)\leq F_{\mathrm{Q}}\left(\rho(\tau,\beta),I_{\mathrm{z}}\right)\leq 2I_{\mathrm{WY}}\left(\rho(\tau,\beta),I_{\mathrm{z}}\right). \tag{39}$$

Заключение

В данной работе была теоретически исследована многочастичная запутанность методами МК спектроскопии ЯМР в нанополости, заполненной спин-несущими атомами (молекулами), и в зигзагоборазной цепочке ядерных спинов в кристалле гамбергита.

Для нанопоры была разработана теория МК ЯМР при низких температурах. В основе теории лежит идея о том, что молекулярная диффузия спин-несущих частиц существенно быстрее, чем время флип-флоп процессов. В результате задача сводится к системе эквивалентных спинов, которая может быть проанализирована на основе общих собственных состояний полного углового момента спина и его проекции на внешнее магнитное поле. Разработанная теория позволила исследовать динамику МК когерентностей ЯМР в системе более 200 частиц. Поскольку удвоенный второй момент (дисперсия) распределения интенсивностей МК когерентностей ЯМР определяет нижнюю границу информации Фишера, которая, в свою очередь, связана с многочастичной запутанностью, удалось получить оценку снизу количества запутанных частиц в системе. Температурная зависимость многочастичной запутанности была исследована для термодинамического равновесного и дипольного упорядоченного начальных состояний. Теоретически было доказано, что дипольное упорядоченное состояние может быть создано двух-импульсной последовательностью Брокаерта-Джинера даже в случае низких зеемановских и высоких дипольных температур. Несмотря на то, что начальное состояние системы не является запутанным, при достаточно низких температурах за короткий промежуток времени МК эксперимента ЯМР почти все частицы оказываются в коллективном запутанном состоянии.

Широко представленные в литературе однородные цепочки ядерных спинов имеют узкий МК спектр ЯМР, поэтому в таких системах удается регистрировать только парную запутанность. Главным ограничением роста запутанных кластеров является слабое взаимодействие частицы с ее следующими ближайшими соседями. В этом контексте особый интерес вызывают зигзагообразные цепочки в кристалле гамбергита. При определённых ориентациях кристалла на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР в зигзагобразной цепочке, в отличие от однородной, нельзя пренебрегать взаимодействием со следующими ближайшими соседями.

Численный анализ МК динамики ЯМР зигзагообразной цепочки позволил исследовать зависимость запутанности от температуры и длины цепочки. Поведение температурной зависимости многочастичной запутанности в зигзагообразной цепочке качественно совпадает с поведением в нанопоре. Результаты исследования запутанности в однородных цепочках полностью согласуются с результатами, представленными в литературе.

Величина косой информации Вигнера-Янасе, так же как и величина квантовой информации Фишера, определяет нижнюю границу количества запутанных частиц в системе. Несмотря на то, что косая информация была введена задолго до квантовой информации Фишера и нашла широкое применения в квантовой теории информации, её связь с наблюдаемыми в эксперименте величинами не была получена. В данной работе впервые предложена теория экспериментального измерения косой информации Вигнера-Янасе в МК эксперименте ЯМР. Полученный результат позволил провести сравнение оценок количества запутанных частиц в нанопоре и зигзагообразной цепочке, извлеченных из величин обеих информаций. Тем не менее, разработанный метод имеет ряд преимуществ в сравнении с методом определения квантовой информации Фишера. Во-первых, он позволяет определять точное значение косой информации, а не ее нижнюю границу. Во-вторых, он является более экспериментально доступным, так как температура исследуемой системы должна быть в два раза выше.

По результатам работы можно заключить, что МК спектроскопия ЯМР является эффективным методом исследования многочастичной запутанности, а также может быть использована для экспериментальных исследований проблем квантовой теории информации в твердых телах.

Выводы

1. Разработана теория МК ЯМР в системе эквивалентных спинов s=1/2 при произвольных температурах. При низких температурах эта теория применена для расчетов многоспиновой запутанности в нанопоре и зигзагообразной цепочке. Проведенные исследования позволяют заключить, что МК-спектроскопия ЯМР является тонким и полезным методом для исследования различных проблем квантовой информатики.

2. Исследована температурная зависимость многочастичной запутанности в нанопоре с термодинамическим равновесным зеемановским и дипольным упорядоченным начальными состояниями. С пониже-

нием температуры количество запутанных спинов растет. При температуре $T = 6.856 \cdot 10^{-3}$ К ($\beta = 3.5$) почти все спины (до 179 из 201) запутаны. Можно заключить, что в типичной системе МК ЯМР при низких температурах возникают многочастичные запутанные состояния, даже при отсутствии запутанности в начальном состоянии.

3. Исследована многочастичная запутанность в квазиодномерных цепочках ядерных спинов в зависимости от параметров цепи и температуры. В однородных цепочках детектируется только парная запутанность, что согласуется с результатами, представленными в литературе. В зигзагообразной цепочке при низких температурах почти все спины запутанны, так же как и в нанопоре.

4. Предложен метод экспериментального измерения точного значения косой информации Вигнера-Янасе в рамках МК спектроскопии ЯМР. Разработанный метод позволяет не только исследовать многочастичную запутанность методами МК ЯМР, но и открывает возможность решения широкого класса задач квантовой теории информации.

Публикации по теме диссертации

Статьи в рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, а также в изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности:

1. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, I. D. Lazarev, Many-particle entanglement in multiple quantum nuclear-magnetic-resonance spectroscopy, *Physical Review A*, 100(2):022330, 2019 (Импакт-фактор – 2.971, Web of Science) (вклад 0.5);

2. И. Д. Лазарев и Э. Б. Фельдман, Многоспиновая запутанность в многоквантовом ЯМР с дипольным упорядоченным начальным состоянием, *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, 158(5):832–839, 2020; I. D. Lazarev and E. B. Fel'dman, Many-Spin Entanglement in Multiple Quantum NMR with a Dipolar Ordered Initial State, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 131(50):723–729, 2020 (Импакт-фактор – 1.111, Web of Science) (вклад 0.7);

3. G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, E.I. Kuznetsova, I.D. Lazarev, S.G. Vasil'ev, V.I. Volkov, 1H NMR in a quasi-one-dimensional zig-zag spin chain of

hambergite, Be2BO3(OH), *Journal of Magnetic Resonance*, 319:106816, 2020 (Импакт-фактор – 2.229, Web of Science) (вклад 0.3);

4. G. A. Bochkin, S. I. Doronin, E. I. Kuznetsova, I. D. Lazarev, E. B. Fel'dman, S. G. Vasil'ev, Many-Spin Entanglement in Zigzag Spin Chain in Multiple Quantum NMR, *Applied Magnetic Resonance*, 51(7):667-678, 2020 (Импакт-фактор – 0.831, Web of Science) (вклад 0.4);

5. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, I. D. Lazarev, Multiple quantum NMR in solids as a method of determination of Wigner–Yanase skew information, *Physics Letters A*, 406:127458, 2021 (Импакт-фактор – 2.707, Web of Science) (вклад 0.5);

Список литературы

[1] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Phys. Rev.*, 47:777–780, May 1935.

[2] Anindita Bera, Tamoghna Das, Debasis Sadhukhan, Sudipto Singha Roy, Aditi Sen(De), and Ujjwal Sen. Quantum discord and its allies: a review of recent progress. *Reports on Progress in Physics*, 81(2):024001, dec 2017.

[3] Mikhail A. Yurishchev. Quantum discord in spin-cluster materials. *Phys. Rev. B*, 84:024418, Jul 2011.

[4] Frank Arute et al. Quantum Supremacy using a Programmable Superconducting Processor. *Nature*, 574:505–510, 2019.

[5] Nicolas Gisin, Grégoire Ribordy, Wolfgang Tittel, and Hugo Zbinden. Quantum cryptography. *Rev. Mod. Phys.*, 74:145–195, Mar 2002.

[6] Géza Tóth. Multipartite entanglement and high-precision metrology. *Phys. Rev. A*, 85:022322, Feb 2012.

[7] Juan Yin et al. Satellite-based entanglement distribution over 1200 kilometers. *Science*, 356(6343):1140–1144, June 2017.

[8] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition.* Cambridge University Press, 2010.

[9] Luca D'Alessio, Yariv Kafri, Anatoli Polkovnikov, and Marcos Rigol. From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. *Advances in Physics*, 65(3):239–362, may 2016.

[10] Pavan Hosur, Xiao-Liang Qi, Daniel A. Roberts, and Beni Yoshida. Chaos in quantum channels. *Journal of High Energy Physics*, 2016(2):4, Feb 2016.

[11] Gonzalo A. Álvarez and Dieter Suter. NMR Quantum Simulation of Localization Effects Induced by Decoherence. *Phys. Rev. Lett.*, 104:230403, Jun 2010.

[12] E. Schrödinger. Discussion of Probability Relations between Separated Systems. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 31(4):555–563, 1935.

[13] Adam M. Kaufman, M. Eric Tai, Alexander Lukin, Matthew Rispoli, Robert Schittko, Philipp M. Preiss, and Markus Greiner. Quantum thermalization through entanglement in an isolated many-body system. *Science*, 353(6301):794–800, aug 2016.

[14] C. Neill et al. Ergodic dynamics and thermalization in an isolated quantum system. *Nature Physics*, 12(11):1037–1041, Nov 2016.

[15] Martin Gärttner, Philipp Hauke, and Ana Maria Rey. Relating Out-of-Time-Order Correlations to Entanglement via Multiple-Quantum Coherences. *Phys. Rev. Lett.*, 120:040402, Jan 2018.

[16] Ryszard Horodecki, Paweł Horodecki, Michał Horodecki, and Karol Horodecki. Quantum entanglement. *Rev. Mod. Phys.*, 81:865–942, Jun 2009.

[17] J. Baum, M. Munowitz, A. N. Garroway, and A. Pines. Multiple-quantum dynamics in solid state NMR. *The Journal of Chemical Physics*, 83(5):2015–2025, September 1985.

[18] Hans Georg Krojanski and Dieter Suter. Scaling of Decoherence in Wide NMR Quantum Registers. *Phys. Rev. Lett.*, 93:090501, Aug 2004.

[19] V E Zobov and A A Lundin. Second moment of multiple-quantum NMR and a time-dependent growth of the number of multispin correlations in solids. *J. Exp. Theor. Phys.*, 103(6):904–916, December 2006.

[20] HyungJoon Cho, Paola Cappellaro, David G. Cory, and Chandrasekhar Ramanathan. Decay of highly correlated spin states in a dipolar-coupled solid: Nmr study of Caf_2. *Phys. Rev. B*, 74:224434, Dec 2006.

[21] G. A. Bochkin, E. B. Fel'dman, S. G. Vasil'ev, and V. I. Volkov. Dipolar Relaxation of Multiple Quantum NMR Coherences as a Model of Decoherence of Many-Qubit Coherent Clusters. *Applied Magnetic Resonance*, 49(1):25–34, Jan 2018.

[22] Serge I. Doronin. Multiple quantum spin dynamics of entanglement. *Phys. Rev. A*, 68:052306, Nov 2003.

[23] G. B. Furman, V. M. Meerovich, and V. L. Sokolovsky. Multiple quantum NMR and entanglement dynamics in dipolar coupling spin systems. *Phys. Rev. A*, 78:042301, Oct 2008.

[24] E. Fel'dman and A. Pyrkov. Evolution of Spin Entanglement and an Entanglement Witness in Multiple-Quantum NMR Experiments. *JETP Letters*, 88:398–401, 01 2008.

[25] E. B. Fel'dman, A. N. Pyrkov, and A. I. Zenchuk. Solid-state multiple quantum NMR in quantum information processing: exactly solvable models. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 370(1976):4690–4712, 2012.

[26] Ken Xuan Wei, Chandrasekhar Ramanathan, and Paola Cappellaro. Exploring Localization in Nuclear Spin Chains. *Phys. Rev. Lett.*, 120:070501, Feb 2018.

[27] Gé za Tóth and Iagoba Apellaniz. Quantum metrology from a quantum information science perspective. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47(42):424006, oct 2014.

[28] Juan Arrazola, Oleg Gittsovich, and Norbert Lütkenhaus. Average iterations of accessible nonlinear witnesses. *AIP Conference Proceedings*, 1633:144–146, 12 2014.

[29] Ruihua Fan, Pengfei Zhang, Huitao Shen, and Hui Zhai. Out-of-time-order correlation for many-body localization. *Science Bulletin*, 62(10):707–711, 2017.

[30] Jonathan Baugh, Alfred Kleinhammes, Daxing Han, Qi Wang, and Yue Wu. Confinement Effect on Dipole-Dipole Interactions in Nanofluids. *Science*, 294(5546):1505–1507, 2001.

[31] G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, E.I. Kuznetsova, I.D. Lazarev, S.G. Vasil'ev, and V.I. Volkov. 1H NMR in a quasi-one-dimensional zig-zag spin chain of hambergite, Be2BO3(OH). *Journal of Magnetic Resonance*, 319:106816, 2020.

[32] G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, I.D. Lazarev, A.A. Samoilenko, and S.G. Vasil'ev. Orientational dependencies of dynamics and relaxation of multiple quantum NMR coherences in one-dimensional systems. *Journal of Magnetic Resonance*, 301:10–18, 2019.

[33] Sergei M Aldoshin, A I Zenchuk, Eduard B Fel'dman, and M A Yurishchev. On the way to creation of materials for quantum computers. *Russian Chemical Reviews*, 81(2):91–104, feb 2012.

[34] Michael Seevinck and Jos Uffink. Sufficient conditions for three-particle entanglement and their tests in recent experiments. *Phys. Rev. A*, 65:012107, Dec 2001.

[35] Zeqian Chen. Wigner - Yanase skew information as tests for quantum entanglement. *Phys. Rev. A*, 71:052302, May 2005.

[36] Otfried Gühne, Géza Tóth, and Hans J Briegel. Multipartite entanglement in spin chains. *New Journal of Physics*, 7:229–229, nov 2005.

[37] Philipp Hyllus, Wiesław Laskowski, Roland Krischek, Christian Schwemmer, Witlef Wieczorek, Harald Weinfurter, Luca Pezzé, and Augusto Smerzi. Fisher information and multiparticle entanglement. *Phys. Rev. A*, 85:022321, Feb 2012.

[38] Edward B Fel'dman and Serge Lacelle. Multiple quantum nuclear magnetic resonance in one-dimensional quantum spin chains. *J. Chem. Phys.*, 107(18):7067–7084, November 1997.

[39] Lev Davidovich Landau and Evgenii Mikhailovich Lifshitz. *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, volume 3. Elsevier, 2013.

[40] Maurice Goldman. *Spin temperature and nuclear magnetic resonance in solids.* Clarendon Press, 1970.

[41] S I Doronin, E B Fel'dman, and A I Zenchuk. The multiple quantum NMR dynamics in systems of equivalent spins with a dipolar ordered initial state. *J. Exp. Theor. Phys.*, 113(3):495–501, September 2011.

[42] C. P. Slichter and William C. Holton. Adiabatic Demagnetization in a Rotating Reference System. *Phys. Rev.*, 122:1701–1708, Jun 1961.

[43] A. Abragam and M. Goldman. *Nuclear magnetism: Order and disorder*. Clarendon Press, United Kingdom, 1982.

[44] J. Jeener and P. Broekaert. Nuclear Magnetic Resonance in Solids: Thermodynamic Effects of a Pair of rf Pulses. *Phys. Rev.*, 157:232–240, May 1967.

[45] E. B. Fel'dman and M. G. Rudavets. Nonergodic nuclear depolarization in nanocavities. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 98(2):207–219, Feb 2004.

[46] S. I. Doronin, A. N. Pyrkov, and É B. Fel'dman. Entanglement in alternating open chains of nuclear spins s $= 1/2$ with the XY Hamiltonian. *JETP Letters*, 85(10):519–523, Jul 2007.

[47] G. A. Bochkin, E. B. Fel'dman, and A. I. Zenchuk. Transfer of scaled multiple-quantum coherence matrices. *Quantum Information Processing*, 17(9):218, Jul 2018.

[48] E B Fel'dman, A N Pechen, and A I Zenchuk. Complete structural restoring of transferred multi-qubit quantum state. *Phys. Lett. A*, 413(127605):127605, October 2021.

[49] A A Zhukov, E O Kiktenko, A A Elistratov, W V Pogosov, and Yu E Lozovik. Quantum communication protocols as a benchmark for programmable quantum computers. *Quantum Inf. Process.*, 18(1), January 2019.

[50] G A Bochkin, E B Fel'dman, I D Lazarev, A N Pechen, and A I Zenchuk. Transfer of zero-order coherence matrix along spin-$1/2$ chain. *Quantum Inf. Process.*, 21(7), July 2022.

[51] I. D. Lazarev and E. I. Kuznetsova. Quantum entanglement in spin chains with the XY Hamiltonian at the quantum state transfer. In Vladimir F. Lukichev and Konstantin V. Rudenko, editors, *International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2018*, volume 11022, pages 630 – 640. International Society for Optics and Photonics, SPIE, 2019.

[52] G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, I.D. Lazarev, A.A. Samoilenko, and S.G. Vasil'ev. Orientational dependencies of dynamics and relaxation of multiple quantum NMR coherences in one-dimensional systems. *Journal of Magnetic Resonance*, 301:10–18, 2019.

[53] S I Doronin, I I Maksimov, and E B Fel'dman. Multiple-quantum dynamics of one-dimensional nuclear spin systems in solids. *J. Exp. Theor. Phys.*, 91(3):597–609, September 2000.

[54] E. P. Wigner and Mutsuo M. Yanase. Information contents of distributions. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 49(6):910–918, 1963.

[55] Edward B Fel'dman and Serge Lacelle. Multiple quantum NMR spin dynamics in one-dimensional quantum spin chains. *Chem. Phys. Lett.*, 253(1-2):27–31, April 1996.

[56] Shunlong Luo. Wigner-Yanase skew information vs. quantum fisher information. *Proc. Am. Math. Soc.*, 132(3):885–890, July 2003.