

# Optimierung von Pulsen zur Entkopplung eines Spins von klassischem Rauschen

Amplituden- und Frequenzmodulation gegen Dephasierung und  
Dekohärenz

Diplomarbeit  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Dipl. Phys.

vorgelegt von  
Christopher Stihl  
aus Dortmund

Lehrstuhl für Theoretische Physik I  
Fakultät Physik  
Otto-Hahn-Str. 4  
44227 Dortmund  
TU Dortmund

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Motivation &amp; Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2. Modell &amp; Herleitungen</b>	<b>7</b>
2.1. Modell . . . . .	7
2.1.1. System-Hamiltonian . . . . .	7
2.1.1.1. Die Rotating Frame Approximation . . . . .	8
2.1.2. Rauschmodell . . . . .	11
2.1.2.1. Zufallsprozesse . . . . .	12
2.1.2.2. Gaußsche Zufallsprozesse als klassisches Rauschen . . . . .	13
2.2. Rechnungen . . . . .	18
<b>3. Reine Dephasierung</b>	<b>24</b>
3.1. Amplitudenmodulation . . . . .	24
3.1.1. Kontinuierliche Pulse . . . . .	29
3.1.1.1. Pulse in erster Ordnung . . . . .	30
3.1.1.2. Pulse in zweiter Ordnung . . . . .	37
3.1.1.3. Pulse in dritter Ordnung . . . . .	45
3.1.2. Komposit-Pulse . . . . .	54
3.1.2.1. Pulse in erster Ordnung . . . . .	55
3.1.2.2. Pulse in zweiter Ordnung . . . . .	62
3.1.2.3. Pulse in dritter Ordnung . . . . .	70
3.2. Frequenzmodulation . . . . .	79
3.2.1. Frequenzmodulierte Lösungen . . . . .	83
3.2.1.1. Pulse erster Ordnung . . . . .	84
3.2.1.2. Pulse zweiter Ordnung . . . . .	89
3.2.1.3. Pulse dritter Ordnung . . . . .	94

<b>4. Allgemeine Dekohärenz</b>	<b>101</b>
4.1. Frequenzmodulation . . . . .	101
4.1.1. Lösungen erster Ordnung . . . . .	104
4.1.2. Lösungen zweiter Ordnung . . . . .	105
<b>5. Fazit &amp; Ausblick</b>	<b>113</b>
<b>A. Appendix</b>	<b>116</b>
A.1. Zusammenhang zwischen Pulsformen und effektiven Rotationsachsen und -winkeln . . . . .	116
A.2. Expliziter Ausdruck für $\mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi)$ . . . . .	118
A.3. Rechnung zur Herleitung einer expliziten Form von $\tilde{H}(t)$ . . . . .	119
A.4. Explizite Berechnung der Korrektur in dritter Ordnung $\mu^{(3)}$ . . . . .	121
A.5. Programmablauf zur numerischen Lösung mit Hilfe der Algorithmen aus “SciPy” . . . . .	124
A.6. Programmabläufe zur numerischen Lösung mit Hilfe der Algorithmen aus der “GNU Scientific Library” (GSL) . . . . .	125
A.6.1. Programmablauf für kontinuierliche, amplitudenmodulierte Pulse in dritter Ordnung . . . . .	125
A.6.2. Programmablauf für frequenzmodulierte Pulse . . . . .	126
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>129</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>130</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>133</b>
<b>Danksagung</b>	<b>136</b>
<b>Erklärung</b>	<b>137</b>

# 1. Motivation & Einleitung

In vielen modernen Experimenten sind die Kohärenzeigenschaften von Quantensystemen von zentraler Bedeutung. Prinzipiell unterliegen Quantensysteme aber durch eine, in der Realität unvermeidbare, Interaktion mit ihrer Umgebung dem Phänomen der Dekohärenz. Diese unter Dekohärenz zusammengefassten Wechselwirkungen führen während der zeitlichen Evolution des Systems zu relativen Phasen zwischen den zum System beitragenden Zuständen, was die Kohärenzeigenschaften des Quantensystems mit fortschreitender Evolution zerstört. Besonders problematisch ist dieses Verhalten von Quantensystemen bei der Entwicklung von Systemen zur Quanteninformationsverarbeitung. Solche, auf quantenmechanischen Prinzipien beruhende, Systeme zur Informationsverarbeitung böten aus quantenmechanischen Prinzipien resultierende Möglichkeiten, wie sie aktuelle, klassische Systeme nicht bieten können. Ein besonders vielversprechendes Beispiel ist der, auf dem Superpositionsprinzip quantenmechanischer Zustände beruhende, Quantenparallelismus. Dieser erlaubt es bestimmte, bisher nicht effizient bzw. in polynomieller Rechenzeit lösbare Probleme, wie die Primfaktorzerlegung, mit einem geeigneten Algorithmus, in diesem Fall dem Shor-Algorithmus, doch effizient zu lösen. Eine weitere neue Fähigkeit solcher Systeme wäre eine, auf dem quantenmechanischen No-Cloning-Theorem beruhende, prinzipiell abhörsichere Kommunikation, die so beispielsweise einen abhörsicheren Schlüsseltausch ermöglichen würde [NC00].

Diese vielversprechenden Perspektiven erklären das immense Forschungsinteresse an unterschiedlichsten Implementierungen solcher quantenmechanischer Systeme zur Informationsverarbeitung wie etwa Qubit-Implementierungen durch gefangene Ionen, (Festkörper-)NMR-Systeme, Quantenpunkte, etc. Dabei muss jedes geeignete System ein einzelnes qubit abhängig vom Zustand eines anderen Qubits gezielt manipulieren können um, ähnlich wie eine Auswahl von Bauteilen boolescher Gatter für klassische Informationsverarbeitung, sogenannte single und dual qubit gates zu implementieren und dadurch universell einsetzbar zu sein. Unabhängig von der tatsächlichen, physikalischen Implementierung muss jedes qubit ein geeignetes System mit mindestens zwei unterscheidbaren Eigenzuständen sein [NC00], von denen je einer als logisches "wahr"  $|1\rangle$  und

logisches "falsch"  $|0\rangle$  interpretiert wird. Infolgedessen kann jedes qubit im Allgemeinen in einem beliebigen Superpositionszustand  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  mit  $|\alpha| + |\beta| = 1$  existieren, was anschaulich jedem Punkt auf der Oberfläche der "Bloch-Kugel", siehe Abbildung 1.1, entspricht. Single qubit gates können so als Rotationen des Zustands  $|\psi\rangle$  aufgefasst werden, die den Zustand  $|\psi\rangle$  auf der Oberfläche der Blochkugel beliebig verschieben können.

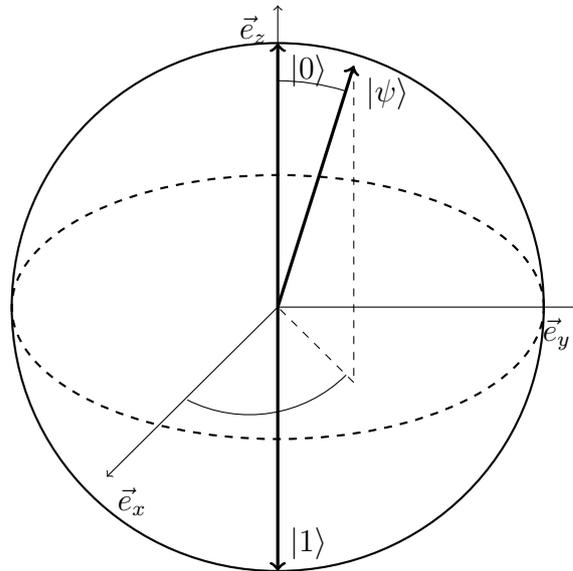


Abbildung 1.1.: Skizze einer typischen Autokorrelationsfunktion

Ein solches Zwei-Niveau-System kann beispielsweise, wie in der "Nuclear Magnetic Resonance" (NMR), durch Teilchen mit Spin  $S = \frac{1}{2}$ , dessen Spinzustandsentartung durch die Zeeman-Aufspaltung in einem Magnetfeld aufgehoben wird, implementiert werden [VC05]. In diesem NMR-Kontext wird die Manipulation der qubits durch geeignete Hochfrequenz-Pulse realisiert. Die besonders anschauliche NMR-Sprache soll auch im Folgenden weiter verwendet werden.

Da ein Quantensystem in der Realität nicht vollständig abgeschirmt werden kann, was auch eine gezielte Messung und Manipulation der qubit-Zustände unmöglich machen würde, ist es der Ansatz von diversen Publikationen die unvermeidbare Kopplung des Systems an die Umwelt, inspiriert durch das Prinzip des Hahn-Echos aus der NMR [Hah50], im Mittel aufzuheben statt gänzlich zu unterdrücken. Dabei gibt es eine Vielzahl von Ansätzen, die sich stark voneinander unterscheiden. Die Unterschiede umfassen dabei so grundsätzliche Punkte wie zum einen die Modellierung der Umwelt

des Quantensystems dessen Ankopplung an das System im Mittel verschwinden soll und das Vorgehen zum Entkoppeln. Dazu finden verschiedene Pulse sowie Pulsfolgen, Dynamical Decoupling (DD) genannt, Anwendung, die wiederum unterschiedlich gut realisierbare Eigenschaften wie Pulslängen, Amplituden, etc. voraussetzen. Betrachtete Modelle für die Umwelt umfassen beispielsweise die Modellierung des Bads als zeitunabhängige, quantenmechanische Störung [PKRU09], als zeitabhängige quantenmechanische Störung [FPU12], sowie klassische Modelle wie  $1/f^\alpha$ -Rauschen [KMB<sup>+</sup>08] und Random Telegraph Noise [CanLNDS08], [MdSZW06]. Die Entwicklung von DD-Pulssequenzen umfasst frühe Ansätze mit äquidistanten und stark idealisierten  $\delta$ -Pulsen unendlich hoher Amplituden und unendlich kurzer Pulslängen [VL98], verbesserte Sequenzen mit nicht mehr zwingend äquidistanten Pulsen wie UDD [Uhr07] und QDD [WFL10], sowie weitere RUDD-Sequenzen [UP10], die realistischere Pulse mit endlichen Amplituden und Pulslängen berücksichtigen. Dazu wurden Pulse mit realistischeren Eigenschaften durch Frequenzmodulation [FPU12] oder durch Amplitudenmodulation [PKRU09] gefunden. Diese Ansätze zum Pulsdesign haben gemein, dass sie bereits während der Pulslänge die Kopplung des qubits an das Bad verschwinden lassen. Das ist ein Resultat eines zunächst verfolgten Ansatzes [PFKU08], der lediglich versuchte Pulse zu finden, die die Evolution von Bad und qubit während des Pulses entkoppeln und so eine Evolution des Systems äquivalent zu einem idealen  $\delta$ -Puls während der tatsächlichen Pulslänge zu erzeugen. Die Ausmittelung der Kopplung sollte bei solchen Pulsen entsprechenden Pulssequenzen überlassen werden. Es wurde allerdings festgestellt, dass dieser Ansatz gewichtige Nachteile mit sich bringt, wie etwa keine Möglichkeit Pulse zu erzeugen, die eine Evolution äquivalent zu einem  $\delta$ -Puls ganz am Ende des Pulsintervalls erzeugen. Gerade diese Pulse sind aber von großer Bedeutung in der experimentellen Praxis. Außerdem konnte gezeigt werden, dass so konstruierte Pulse keine  $\pi$ -Pulse in zweiter Ordnung in der Pulslänge realisieren können.

In dieser Arbeit sollen deshalb neue Pulse gefunden werden, die die Ankopplung an die Umwelt im Mittel verschwinden lassen. Dabei wird die Umwelt als schwankende, klassische Größe mit statistischen Eigenschaften modelliert. Von besonderer Interesse in der Quanteninformationsverarbeitung und anderen experimentellen Szenarien sind  $\frac{\pi}{2}$ - und  $\pi$ -Pulse. Es werden im Folgenden zur Unterdrückung von reiner Dephasierung amplituden- oder frequenzmodulierte Pulse bis zu dritter Ordnung in der Pulslänge gefunden. Zur Unterdrückung allgemeiner Dekohärenz werden frequenzmodulierte Pulse bis in zweiter Ordnung in der Pulslänge gefunden.

## 2. Modell & Herleitungen

In diesem Kapitel wird das zugrunde liegende Modell erläutert und die Bedingungen hergeleitet, die von den gesuchten Pulsen in den jeweiligen Ordnungen erfüllt werden müssen. Dazu wird eine Entwicklung in der Pulslänge  $\tau_p$  analog zu dem von Pasini et al. [PKRU09] gewählten Vorgehen angesetzt. Das Resultat dieses Kapitels werden dann für die jeweiligen Ordnungen gültige Bedingungen sein, die für den allgemeinsten Fall, also im Fall allgemeiner Dekohärenz, gelten. Im weiteren Verlauf der Arbeit werden diese Gleichungen dann herangezogen um Spezialfälle wie reine Dephasierung bei fester Rotationsachse, etc. durch Einsetzen entsprechender Ansätze betrachten zu können.

### 2.1. Modell

Es wird ein Modell betrachtet, das die allgemeinste Kopplung eines Spin  $S = \frac{1}{2}$  an ein, sich klassisch verhaltendes, Bad modelliert. Im Folgenden sollen dazu zunächst das betrachtete Modell durch seinen Hamiltonoperator formal eingeführt und die Modellierung des klassischen Bads erläutert werden.

#### 2.1.1. System-Hamiltonian

Der System-Hamiltonian ist mit

$$\mathcal{H}_{\text{sys}}(t) = \underbrace{\vec{v}(t)}_{\mathcal{H}_0(t)} \vec{\sigma} + \underbrace{\vec{\eta}(t)}_{\mathcal{H}(t)} \vec{\sigma}, \quad (2.1)$$

gegeben. Darin modelliert  $\mathcal{H}_0(t)$  den Kontrollpuls durch den dreidimensionalen Vektor  $\vec{v}(t) = (v_x(t), v_y(t), v_z(t))^T$ . Dieser Vektor beschreibt die Pulsform des Kontrollpulses in den drei Raumrichtungen durch ihre Amplituden in Abhängigkeit der vergangenen Zeit  $t$ . Diese Amplituden koppeln mit dem Vektor der Paulimatrizen  $\vec{\sigma}$  an die entsprechenden Spinkomponenten.

Die Kopplung an das klassische Rauschen wird durch  $\mathcal{H}(t)$  modelliert. Dabei wird

das klassische Rauschen als drei, zu jedem Zeitpunkt  $t$  zufällige Variablen  $\vec{\eta}(t) = (\eta_x(t), \eta_y(t), \eta_z(t))^T$  modelliert, die über den Paulimatrixvektor  $\vec{\sigma}$  an die drei Spin-komponenten koppeln.

Jede Komponente von  $\vec{\eta}(t)$  ist eine zu allen Zeiten  $t$  zufällige Zahl aus  $\mathbb{R}$ . Dies führt für  $\vec{\eta}(t)$  auf einem Vektor aus drei zufälligen oder stochastischen Prozessen. Genauer wird das betrachtete Rauschmodell in Abschnitt 2.1.2 erläutert.

Die besonders einfache Form des Kontroll-Hamiltonians  $\mathcal{H}_0(t)$  ist der, in der NMR üblichen, "rotating frame approximation" zu verdanken. Sie wird im folgenden Abschnitt erläutert, indem die später gemachten Ansätze zu ihrer möglichen Realisierung im Laborsystem in Bezug gesetzt werden.

### 2.1.1.1. Die Rotating Frame Approximation

Die grundlegende Idee der "rotating frame approximation" ist in ein Bezugssystem zu transformieren, das sich "mit dem Spin" dreht [Lev01]. Dazu wird der Zusammenhang zwischen Zuständen im statischen Referenzsystem  $|\psi\rangle$  und Zuständen im mit  $\omega_{\text{ref}}$  rotierenden Bezugssystem  $|\tilde{\psi}\rangle$  gemäß

$$|\tilde{\psi}\rangle = \mathcal{D}_z(-\phi(t)) |\psi\rangle \quad (2.2)$$

für

$$\mathcal{D}_z(\phi(t)) = \exp[-i\phi(t)\mathcal{I}_z] \quad (2.3)$$

und  $\phi(t) = \omega_{\text{ref}} \cdot t$  herangezogen. So ergibt sich aus

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}\rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \{ \mathcal{D}_z(-\phi(t)) |\psi\rangle \} \\ &= \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{D}_z(-\phi(t)) \right\} |\psi\rangle + \mathcal{D}_z(-\phi(t)) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \right\} \end{aligned}$$

mit Gleichung (2.2) und der Schrödingergleichung  $\frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = -i\mathcal{H} |\psi\rangle$

$$\mathcal{D}_z(-\phi(t)) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \right\} = -i\mathcal{D}_z(-\phi(t)) \mathcal{H} |\psi\rangle = -i\mathcal{D}_z(-\phi(t)) \mathcal{H} \mathcal{D}_z(\phi(t)) |\tilde{\psi}\rangle,$$

mit Gleichung (2.3), (2.2) und  $\phi(t) = \omega_{\text{ref}} \cdot t$  folgt

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{D}_z(-\phi(t)) \right\} |\psi\rangle = i\omega_{\text{ref}} \mathcal{I}_z \mathcal{D}_z(-\phi(t)) |\psi\rangle = i\omega_{\text{ref}} \mathcal{I}_z |\tilde{\psi}\rangle.$$

Zusammen ergibt sich dann die Schrödingergleichung im rotierenden Bezugssystem

$$\frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}\rangle = -i\tilde{\mathcal{H}} |\tilde{\psi}\rangle$$

mit

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{D}_z(-\phi(t)) \mathcal{H} \mathcal{D}_z(\phi(t)) - \omega_{\text{ref}} \mathcal{I}_z. \quad (2.4)$$

Im festen Referenzsystem des Labors wird ein hochfrequentes Feld entlang der  $x$ -Achse gemäß

$$V_{\text{rf}}(t) = 4V(t) \cos(\omega_{\text{ref}} \cdot t + \Omega(t) + \phi_p) \vec{e}_x$$

beschrieben. Wirkt ein solches Feld nur innerhalb eines Zeitintervalls  $0 \leq t \leq \tau_p$ , so stellt es einen hochfrequenten Puls der Dauer  $\tau_p$  dar. Ein Puls dieser Form trägt eine gemäß  $V(t)$  modulierte Amplitude sowie eine durch  $\Omega(t)$  beschriebene zeitliche Modulation seiner Frequenz. Weiter kann ein solches Feld durch die Summe gegeneinander mit  $\omega_{\text{ref}}$  rotierender Felder gemäß

$$V_{\text{rf}}(t) = V_{\text{rf, res}}(t) + V_{\text{rf, non-res}}(t)$$

mit

$$\begin{aligned} V_{\text{rf, res}}(t) &= 2V(t) (\cos(\omega_{\text{ref}} \cdot t + \Omega(t) + \phi_p) \vec{e}_x + \sin(\omega_{\text{ref}} \cdot t + \Omega(t) + \phi_p) \vec{e}_y) \\ V_{\text{rf, non-res}}(t) &= 2V(t) (\cos(\omega_{\text{ref}} \cdot t + \Omega(t) + \phi_p) \vec{e}_x - \sin(\omega_{\text{ref}} \cdot t + \Omega(t) + \phi_p) \vec{e}_y) \end{aligned}$$

beschrieben werden. Dabei wurden die Bezeichnungen "res" bzw. "non-res" für Rotationen in Richtung bzw. Gegenrichtung der Spin-Präzession im konstanten Magnetfeld entlang  $\vec{e}_z$  gewählt. Als "rotating wave approximation" wird das Vernachlässigen des, nach einer Transformation in das rotierende Bezugssystem schnell oszillierenden, Anteils  $V_{\text{rf, non-res}}$  bezeichnet. Diese Näherung ist insbesondere dann gut, wenn stets  $|V(t)|$  sehr viel kleiner als der Betrag des statischen Feldes in  $\vec{e}_z$  ist, in dem der Spin präzessiert.

Ein solches Feld führt dann auf einen Kontrollpuls-Hamiltonian

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0(t) &= 2V(t) (\cos(\omega_{\text{ref}} \cdot t + \Omega(t) + \phi_p) \mathcal{I}_x + \sin(\omega_{\text{ref}} \cdot t + \Omega(t) + \phi_p) \mathcal{I}_y) \\ &= 2V(t) \mathcal{D}_z(\Phi_p) \mathcal{I}_x \mathcal{D}_z(-\Phi_p)\end{aligned}$$

mit  $\Phi_p = \omega_{\text{ref}} \cdot t + \Omega(t) + \phi_p$ . Der so resultierende Spin-Hamiltonian ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(t) &= \omega_L \mathcal{I}_z + \mathcal{H}_0(t) \\ &= \omega_L \mathcal{I}_z + 2V(t) \mathcal{D}_z(\Phi_p) \mathcal{I}_x \mathcal{D}_z(-\Phi_p)\end{aligned}$$

mit der Larmorfrequenz  $\omega_L$ . Wird dieser Hamiltonian für einen mit der Larmor-Frequenz  $\omega_L$  angelegten Puls gemäß Gleichung (2.4) in ein mit  $\omega_{\text{ref}} = \omega_L$  rotierendes Bezugssystem transformiert, so folgt

$$\tilde{\mathcal{H}}(t) = \mathcal{D}_z(-\phi(t)) (\omega_L \mathcal{I}_z + 2V(t) \mathcal{D}_z(\Phi_p) \mathcal{I}_x \mathcal{D}_z(-\Phi_p)) \mathcal{D}_z(\phi(t)) - \omega_L \mathcal{I}_z.$$

Mit Ausmultiplizieren und  $[\mathcal{D}_z(-\phi(t)), \mathcal{I}_z]_- = 0$  ergibt sich

$$\begin{aligned}&= \omega_L \mathcal{I}_z + 2V(t) \mathcal{D}_z(\Phi_p - \phi(t)) \mathcal{I}_x \mathcal{D}_z(\phi(t) - \Phi_p) - \omega_L \mathcal{I}_z \\ &= 2V(t) \mathcal{D}_z(\Phi_p - \phi(t)) \mathcal{I}_x \mathcal{D}_z(\phi(t) - \Phi_p).\end{aligned}$$

Mit  $\Phi_p = \omega_L \cdot t + \Omega(t) + \phi_p$  und  $\phi(t) = \omega_L \cdot t$  ergibt sich

$$\begin{aligned}&= 2V(t) \mathcal{D}_z(\Omega(t) + \phi_p) \mathcal{I}_x \mathcal{D}_z(-(\Omega(t) + \phi_p)) \\ &= 2V(t) (\cos(\Omega(t) + \phi_p) \mathcal{I}_x + \sin(\Omega(t) + \phi_p) \mathcal{I}_y),\end{aligned}$$

also letztlich

$$\tilde{\mathcal{H}}(t) = 2V(t) (\cos(\Omega(t) + \phi_p) \mathcal{I}_x + \sin(\Omega(t) + \phi_p) \mathcal{I}_y). \quad (2.5)$$

In dieser Arbeit werden amplitudenmodulierte Pulse mit, im rotierenden Bezugssystem, zeitlich konstanter Drehachse  $\vec{e}_y$  und konstanter Frequenz  $\omega_L$  sowie frequenzmodulierte Pulse mit zeitlich veränderlichen Drehachsen mit konstanter Amplitude  $V(t) = V_0$  betrachtet.

Die im Folgenden gemachten Ansätze ergeben sich für die Amplitudenmodulation aus

Gleichung (2.5) mit  $\Omega(t) = 0$  und  $\phi_p = \frac{\pi}{2}$  explizit zu

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\text{am}}(t) = 2V(t) \mathcal{I}_y.$$

Für die im Folgenden angesetzte Frequenzmodulation ergibt sich aus Gleichung (2.5) mit  $V(t) = V_0$  und  $\phi_p = 0$  explizit zu

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\text{fm}}(t) = 2V_0 (\cos(\Omega(t)) \mathcal{I}_x + \sin(\Omega(t)) \mathcal{I}_y).$$

Mit den Spinoperatoren  $\mathcal{I}_i \propto \frac{\sigma_i}{2}$  ergeben sich so exakt die gemachten Ansätze für die Kontrollpulse.

## 2.1.2. Rauschmodell

Das als Zufallsvariable modellierte Rauschen soll den Einfluss der Umwelt auf das betrachtete qubit-System modellieren. Dazu wird angenommen, dass das Verhalten der Umwelt sich zu jedem Zeitpunkt aus einer makroskopisch großen Summe mikroskopischer, quantenmechanischer Vorgänge ergibt [Jac10]. Während jeder einzelne dieser beitragenden Vorgänge quantenmechanischer Natur ist, soll nur die makroskopisch große Summe aller dieser Vorgänge betrachtet werden. Dies motiviert die Annahme, dass die Umwelt als makroskopisch große Summe mikroskopischer, quantenmechanischer Vorgänge den quantenmechanischen Charakter verliert und als klassische, zu allen Zeiten zufällig fluktuierende Variable betrachtet werden kann. Die zu dieser Summe beitragenden Vorgänge sind dabei von unterschiedlichster physikalischer Herkunft. Darunter beispielsweise Beiträge von unzähligen, sich zufällig bewegenden geladenen Teilchen wie Elektronen, Beiträge aus den Wechselwirkungen großer Mengen von Photonen, sowie vieler Phononen, etc. Alle diese Vorgänge erzeugen im Allgemeinen unterschiedlich verteilte Zufallsvariablen, die in ihrer Summe letztlich das Verhalten des zu modellierenden Bads bestimmen. Das Bad ergibt sich so zu jedem Zeitpunkt als große Summe über unterschiedlich verteilte Zufallsvariablen. Entsprechend einer allgemeinen Formulierung des zentralen Grenzwertsatzes der Statistik ist zu erwarten, dass sich die Verteilung solcher Summen von Zufallsvariablen einer Gaußverteilung annähern und im Grenzfall unendlich vieler beitragender Zufallsvariablen eine exakte Gaußverteilung liefern [Gar83].

Das führt auf die Wahl von Gaußschen Zufallsprozessen als Modell für den Einfluss des Bads. Die folgenden Abschnitte sollen solche Zufallsprozesse einführen und statistische Eigenschaften der tatsächlich für das Bad betrachteten Gauß-Prozesse diskutieren.

### 2.1.2.1. Zufallsprozesse

Ein zeitkontinuierlicher, stetiger stochastischer Prozess oder Zufallsprozess  $X(t)$  kann als zu jeder Zeit  $t \in \mathbb{R}^+$  als stetige Zufallsvariable mit möglichen Ausgängen  $x(t) \in \mathbb{R}$  einer im allgemeinen zeitlich veränderlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung aufgefasst werden. Vollständig charakterisiert werden die statistischen Eigenschaften stetiger, stochastischer Prozesse neben einer, durch eine entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte  $W_1(x_1, t_1)$  gegebenen, Wahrscheinlichkeitsverteilung durch weitere Verbundwahrscheinlichkeitsverteilungen. Das führt auf einen Satz von im allgemeinen beliebig vielen Wahrscheinlichkeitsdichten

$$\begin{aligned} &W_1(x_1, t_1) \\ &W_2(x_2, t_2; x_1, t_1) \\ &\vdots \\ &W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1), \end{aligned} \tag{2.6}$$

die die Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\{X(t_1)\} &= \int_{-\infty}^{\infty} x_1 W_1(x_1, t_1) dx_1 \\ \mathcal{E}\{X(t_1)X(t_2)\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x_1 x_2 W_2(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_1 dx_2 \\ &\vdots \\ \mathcal{E}\{X(t_1)\dots X(t_n)\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} x_1 \dots x_n W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_1 \dots dx_n \end{aligned} \tag{2.7}$$

bestimmen. Wobei sich Verbundwahrscheinlichkeiten

$$P_n := P(x_n < X(t_n) < x_n + dx_n; \dots; x_1 < X(t_1) < x_1 + dx_1)$$

gemäß

$$P_n = W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_n \dots dx_1$$

ergeben. Die Wahrscheinlichkeitsdichten erfüllen dabei die Konsistenzbedingungen

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} W_1(x_1, t_1) dx_1 &= 1 \\
 \int_{-\infty}^{\infty} W_2(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_2 &= W_1(x_1, t_1) \\
 &\vdots \\
 \int_{-\infty}^{\infty} W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_n &= W_{n-1}(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1)
 \end{aligned}$$

sowie im Fall von stationären Zufallsprozessen

$$W_n(x_n, t_n + \tau; \dots; x_1, t_1 + \tau) = W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) \quad (2.8)$$

für beliebige  $\tau$  [Pap91].

### 2.1.2.2. Gaußsche Zufallsprozesse als klassisches Rauschen

Von besonderem Interesse sind stationäre, gaußsche Zufallsprozesse, da das klassische Rauschen durch drei solche gaußschen, stochastischen Prozesse  $\eta_x(t)$ ,  $\eta_y(t)$  und  $\eta_z(t)$  modelliert wird.

Ein stochastischer Prozess ist ein Gauß-Prozess, wenn sämtliche Wahrscheinlichkeitsdichten (2.6) durch multivariate Gaußverteilungen gegeben sind, also insbesondere auch

$$W_1(x_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x_1 - \mu}{\sigma}\right)^2} \quad (2.9)$$

mit Erwartungswert  $\mu$  und Standardabweichung  $\sigma$  gilt. Eine direkte Folge davon ist, dass auch der Gauß-Prozess, wie die Normalverteilung, durch die ersten beiden gemäß (2.7) gegebenen Momente vollständig charakterisiert wird, siehe [Cha83]. Damit sind die charakterisierenden Größen des stationären Gauß-Prozesses durch den Erwartungswert

$$\bar{\eta} = \mathcal{E}\{\eta(t_1)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \eta_1 W_1(\eta_1, t_1) d\eta_1 \quad (2.10)$$

und die Autokorrelationsfunktion

$$R_{\eta\eta}(t_1, t_2) = \mathcal{E} \{ \eta(t_1) \eta(t_2) \} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \eta_1 \eta_2 W_2(\eta_2, t_2; \eta_1, t_1) d\eta_1 d\eta_2 = R_{\eta\eta}(\Delta t)$$

mit  $\Delta t = t_1 - t_2$ , bei gemäß (2.8) stationärem Prozess, gegeben.

Gemäß Isserlis Theorem [Iss18] gilt für die Momente einer mehrdimensionalen Normalverteilung mit verschwindenden Erwartungswerten  $\mathcal{E} \{x_1\}, \dots, \mathcal{E} \{x_n\}$  und  $n \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} \mathcal{E} \{x_1, x_2, \dots, x_{2n}\} &= \sum \prod \mathcal{E} \{x_i x_j\}, \\ \mathcal{E} \{x_1, x_2, \dots, x_{2n+1}\} &= 0, \end{aligned}$$

demnach zerfällt jedes Moment gerader Ordnung in eine Summe über die Korrelationen zwischen allen möglichen Paaren und sämtliche ungerade Momente verschwinden. Damit resultiert für das dritte Moment des hier betrachteten stochastischen Prozesses als eine Folge von normalverteilten Zufallsvariablen mit  $\Delta\eta(t_i) \equiv \eta(t_i) - \bar{\eta}$  und  $n = 1$

$$\begin{aligned} \mathcal{E} \{ \Delta\eta(t_1) \Delta\eta(t_2) \Delta\eta(t_3) \} &\stackrel{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow \mathcal{E} \{ \Delta\eta(t_1) \Delta\eta(t_2) \Delta\eta(t_3) \} &= \mathcal{E} \{ \eta(t_1) \eta(t_2) \eta(t_3) \} \\ &\quad - \bar{\eta} (R_{\eta\eta}(t_1, t_2) + R_{\eta\eta}(t_1, t_3) + R_{\eta\eta}(t_2, t_3)) \\ &\quad + 2\bar{\eta}^3. \end{aligned}$$

Dazu wurde das Produkt  $(\eta(t_1) - \bar{\eta}) \cdot (\eta(t_2) - \bar{\eta}) \cdot (\eta(t_3) - \bar{\eta})$  ausmultipliziert und anschließend die Linearität der Mehrfachintegration  $\mathcal{E} \{ \dots \}$  ausgenutzt. Es folgt dann abschließend

$$\mathcal{E} \{ \eta(t_1) \eta(t_2) \eta(t_3) \} = \bar{\eta} (R_{\eta\eta}(t_1, t_2) + R_{\eta\eta}(t_1, t_3) + R_{\eta\eta}(t_2, t_3)) - 2\bar{\eta}^3 \quad (2.11)$$

für das Moment dritter Ordnung.

Die Wahl spezifischer Erwartungswerte und Autokorrelationen führt auf wichtige Beispiele gaußscher Prozesse wie weißes Rauschen mit  $\bar{\eta} = 0$ ,  $R_{\eta\eta}(t_1, t_2) = \alpha\delta(t_1 - t_2)$ . Weitere wichtige Beispiele eines gaußschen Prozesses sind Ornstein-Uhlenbeck-Prozesse mit im wesentlichen zeitlich exponentiell abfallenden Erwartungswert und Autokorrelation, sowie der Wiener-Prozess.

In dieser Arbeit soll keine Entscheidung für einen spezifischen Fall getroffen werden.

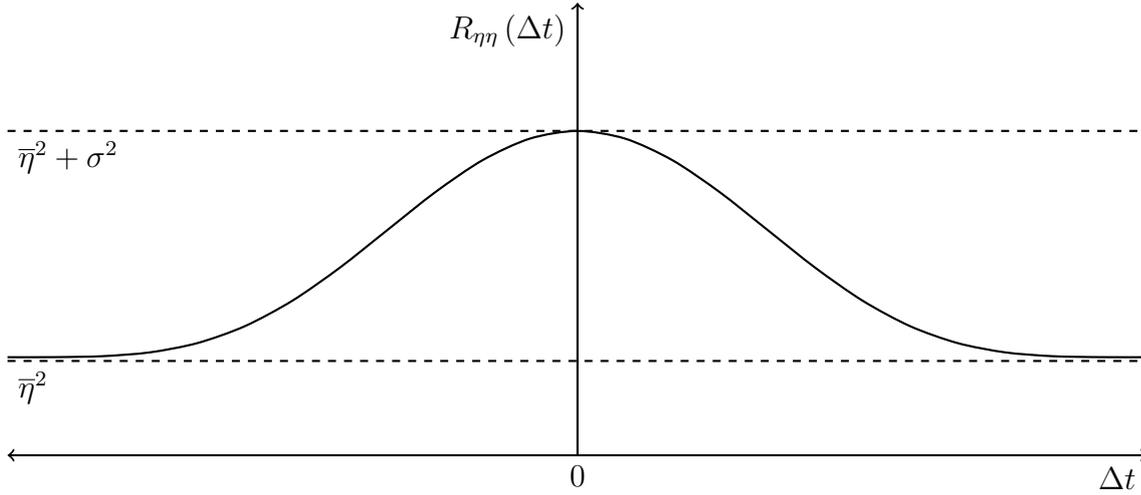


Abbildung 2.1.: Skizze einer typischen Autokorrelationsfunktion

Stattdessen wird eine typische, plausible Form der Autokorrelation wie in Abbildung 2.1 gezeigt angenommen. Eine solche Autokorrelationsfunktion führt durch Taylorentwicklung um  $t_1 - t_2 = \Delta t = 0$  mit

$$R_{\eta\eta}(\Delta t) = \bar{\eta}^2 + C_{\eta\eta}(\Delta t) \quad (2.12)$$

und der Varianz  $\sigma = C_{\eta\eta}(0)$  von  $\eta(t)$  auf

$$\begin{aligned} R_{\eta\eta}(\Delta t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n R_{\eta\eta}(\Delta t)}{\partial \Delta t^n} \right|_{\Delta t=0} \cdot (\Delta t)^n \\ &= \underbrace{R_{\eta\eta}(0)}_{\bar{\eta}^2 + C_{\eta\eta}(0)} + \underbrace{R_{\eta\eta}^{(1)}(0)}_0 \cdot \Delta t + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n R_{\eta\eta}(\Delta t)}{\partial \Delta t^n} \right|_{\Delta t=0} \cdot (\Delta t)^n \\ &= \bar{\eta}^2 + \sigma^2 + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n R_{\eta\eta}(\Delta t)}{\partial \Delta t^n} \right|_{\Delta t=0} \cdot (\Delta t)^n. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Die Modellierung von allgemeiner Dekohärenz benötigt neben den Erwartungswerten und Autokorrelationsfunktionen der stochastischen Prozesse  $\eta_x(t)$ ,  $\eta_y(t)$  und  $\eta_z(t)$  auch Kreuzkorrelationsfunktionen  $R_{kl}(\Delta t)$  mit  $k, l = \{x, y, z\}$ ,  $k \neq l$  zwischen den drei stochastischen Prozessen. Das Rauschen entstammt typischerweise aus einer Umgebung, die durch ein starkes Magnetfeld zur Spin-Niveaufspaltung eine ausgezeichnete  $z$ -Achse aufweist und so eine Rotationssymmetrie um  $\vec{e}_z$  besitzt. Es ist daher angemessen anzunehmen, dass die stochastischen Prozesse in  $x$  und  $y$  die selben statistischen

Eigenschaften

$$\overline{\eta_x} = \overline{\eta_y}$$

und

$$R_{xx}(\Delta t) = R_{yy}(\Delta t)$$

besitzen. Da lediglich die  $z$ -Achse durch das Magnetfeld ausgezeichnet ist sollte bei einer Rotation  $\mathcal{D}_z(\pi)$  von  $\pi$  um  $z$

$$\begin{aligned} \overline{\eta_x} &\stackrel{\mathcal{D}_z(\pi)}{=} -\overline{\eta_x} \\ \overline{\eta_y} &\stackrel{\mathcal{D}_z(\pi)}{=} -\overline{\eta_y} \\ \overline{\eta_z} &\stackrel{\mathcal{D}_z(\pi)}{=} \overline{\eta_z} \end{aligned}$$

gelten, die statistischen Eigenschaften des Rauschens sollten also erhalten bleiben. Daraus folgt für die Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \overline{\eta_x} &= 0 \\ \overline{\eta_y} &= 0 \\ \overline{\eta_z} &= \overline{\eta}. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Für die Autokorrelationsfunktionen gilt gemäß (2.12) und mit den Erwartungswerten (2.14)

$$\begin{aligned} R_{xx}(\Delta t) &= \overline{\eta_x}^2 + C_{xx}(\Delta t) = C_{xx}(\Delta t) \\ R_{yy}(\Delta t) &= \overline{\eta_y}^2 + C_{yy}(\Delta t) = C_{yy}(\Delta t) \\ R_{zz}(\Delta t) &= \overline{\eta_z}^2 + C_{zz}(\Delta t) = \overline{\eta}^2 + C_{zz}(\Delta t). \end{aligned}$$

Mit einer Taylorentwicklung um  $\Delta t = 0$  analog zu (2.13) folgt daraus

$$\begin{aligned} R_{xx}(\Delta t) &= \sigma^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n C_{xx}(\Delta t)}{\partial \Delta t^n} \right|_{\Delta t=0} \cdot (\Delta t)^n \\ R_{yy}(\Delta t) &= \sigma^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n C_{yy}(\Delta t)}{\partial \Delta t^n} \right|_{\Delta t=0} \cdot (\Delta t)^n \\ R_{zz}(\Delta t) &= \overline{\eta}^2 + \sigma_z^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n C_{zz}(\Delta t)}{\partial \Delta t^n} \right|_{\Delta t=0} \cdot (\Delta t)^n. \end{aligned} \tag{2.15}$$

Für die Kreuzkorrelationen in der  $x$ - $y$ -Ebene gilt einerseits

$$\begin{aligned} R_{xy}(\Delta t) &= \mathcal{E} \{ \eta_x(t_1) \eta_y(t_2) \} = \mathcal{E} \{ \eta_y(t_2) \eta_x(t_1) \} = R_{yx}(-\Delta t) \\ R_{yx}(\Delta t) &= \mathcal{E} \{ \eta_y(t_1) \eta_x(t_2) \} = \mathcal{E} \{ \eta_x(t_2) \eta_y(t_1) \} = R_{xy}(-\Delta t). \end{aligned}$$

Andererseits muss mit dem Argument der Symmetrie um die durch das Magnetfeld ausgezeichnete  $z$ -Achse Invarianz gegenüber Rotationen um  $z$  folgen. Für eine Rotation  $\mathcal{D}_z\left(\frac{\pi}{2}\right)$  von  $\frac{\pi}{2}$  um  $z$  folgt so

$$\begin{aligned} R_{xy}(\Delta t) &= \mathcal{E} \{ \eta_x(t_1) \eta_y(t_2) \} \stackrel{\mathcal{D}_z\left(\frac{\pi}{2}\right)}{=} -\mathcal{E} \{ \eta_y(t_1) \eta_x(t_2) \} = -R_{yx}(\Delta t) \\ R_{yx}(\Delta t) &= \mathcal{E} \{ \eta_y(t_1) \eta_x(t_2) \} \stackrel{\mathcal{D}_z\left(\frac{\pi}{2}\right)}{=} -\mathcal{E} \{ \eta_x(t_1) \eta_y(t_2) \} = -R_{xy}(\Delta t). \end{aligned}$$

So folgt

$$\begin{aligned} -R_{xy}(\Delta t) &= R_{yx}(-\Delta t) \\ -R_{yx}(\Delta t) &= R_{xy}(-\Delta t), \end{aligned}$$

bei einer stetigen Kreuzkorrelationsfunktion erzwingt das insbesondere

$$\begin{aligned} R_{xy}(0) &= 0 \\ R_{yx}(0) &= 0, \end{aligned}$$

was letztlich durch eine Taylorentwicklung um  $\Delta t = 0$  auf die Kreuzkorrelationen

$$\begin{aligned} R_{xy}(\Delta t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n C_{xy}(\Delta t)}{\partial \Delta t^n} \right|_{\Delta t=0} \cdot (\Delta t)^n \\ R_{yx}(\Delta t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n C_{yx}(\Delta t)}{\partial \Delta t^n} \right|_{\Delta t=0} \cdot (\Delta t)^n \end{aligned} \quad (2.16)$$

ohne konstanten Beitrag führt.

Für die Kreuzkorrelationen  $R_{xz}(t)$ ,  $R_{yz}(t)$  sowie  $R_{zx}(t)$  und  $R_{zy}(t)$  ergibt sich erneut durch die Forderung der Invarianz gegenüber Drehungen um die  $z$ -Achse für eine Rotation  $\mathcal{D}_z(\pi)$  von  $\pi$  um  $z$

$$\begin{aligned} R_{xz}(t) &= \mathcal{E} \{ \eta_x(t_1) \eta_z(t_2) \} \stackrel{\mathcal{D}_z(\pi)}{=} -\mathcal{E} \{ \eta_x(t_1) \eta_z(t_2) \} = -R_{xz}(t) \\ R_{yz}(t) &= \mathcal{E} \{ \eta_y(t_1) \eta_z(t_2) \} \stackrel{\mathcal{D}_z(\pi)}{=} -\mathcal{E} \{ \eta_y(t_1) \eta_z(t_2) \} = -R_{yz}(t) \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} R_{zx}(t) &= \mathcal{E} \{ \eta_z(t_1) \eta_x(t_2) \} \stackrel{\mathcal{D}_z(\pi)}{=} -\mathcal{E} \{ \eta_z(t_1) \eta_x(t_2) \} = -R_{zx}(t) \\ R_{zy}(t) &= \mathcal{E} \{ \eta_z(t_1) \eta_y(t_2) \} \stackrel{\mathcal{D}_z(\pi)}{=} -\mathcal{E} \{ \eta_z(t_1) \eta_y(t_2) \} = -R_{zy}(t). \end{aligned}$$

Daraus folgen schließlich die übrigen Kreuzkorrelationen

$$\begin{aligned} R_{xz}(t) &= 0 \\ R_{yz}(t) &= 0 \\ R_{zx}(t) &= 0 \\ R_{zy}(t) &= 0. \end{aligned} \tag{2.17}$$

## 2.2. Rechnungen

Der System-Hamilton-Operator (2.1) bestimmt die zeitliche Entwicklung des betrachteten Systems. Damit folgt gemäß der Schrödingergleichung

$$i\partial_\tau \mathcal{U}_p(\tau, 0) |\psi\rangle_{\text{init}} = \mathcal{H}_{\text{sys}}(\tau) \mathcal{U}_p(\tau, 0) |\psi\rangle_{\text{init}}. \tag{2.18}$$

unabhängig vom Startzustand  $|\psi\rangle_{\text{init}}$  die unitäre Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_p(\tau_p, 0) &= \mathcal{T} \left\{ e^{-i \int_0^{\tau_p} \mathcal{H}_{\text{sys}}(t) dt} \right\} \\ &= \mathcal{T} \left\{ e^{-i \int_0^{\tau_p} \mathcal{H}_0(t) + \mathcal{H}(t) dt} \right\} \\ &= \mathcal{T} \left\{ e^{-i \int_0^{\tau_p} \underbrace{\vec{v}(t) \vec{\sigma}}_{\mathcal{H}_0(t)} + \underbrace{\vec{\eta}(t) \vec{\sigma}}_{\mathcal{H}(t)} dt} \right\} \end{aligned}$$

mit dem üblichen Zeitordnungsoperator  $\mathcal{T} \{ \dots \}$  für die Dauer des Pulses  $\tau_p$ . Für diese Zeitentwicklung wird der Ansatz

$$\mathcal{U}_p(\tau_p, 0) = \mathcal{T} \left\{ e^{-i \int_0^{\tau_p} \vec{v}(t) \vec{\sigma} dt} \right\} \mathcal{U}(\tau_p, 0) \tag{2.19}$$

mit dem Korrekturterm  $\mathcal{U}(\tau_p, 0)$  angesetzt,  $\mathcal{T} \left\{ e^{-i \int_0^{\tau_p} \vec{v}(t) \vec{\sigma} dt} \right\}$  beschreibt dabei die durch den Puls induzierte Evolution. Diese kann mit

$$\mathcal{T} \left\{ e^{-i \int_0^{\tau} \vec{v}(t) \vec{\sigma} dt} \right\} := \mathcal{P}_\tau = \exp \left\{ -i \vec{\sigma} \vec{a}(\tau) \frac{\psi(\tau)}{2} \right\} \quad (2.20)$$

als während der vergangenen Zeit  $\tau$  erzeugte Rotation des Spins um die effektive Achse  $\vec{a}(\tau)$ ,  $|a(t)| = 1$  und den effektiven Winkel  $\psi(\tau)$  geschrieben werden. Für die Schrödingergleichung (2.18), dem System-Hamiltonian gemäß (2.1), der Notation als effektive Rotation (2.20) und dem Ansatz für die Zeitentwicklung (2.19) gilt dann

$$\begin{aligned} i\partial_\tau \mathcal{U}_p(\tau, 0) &= \mathcal{H}_{\text{sys}} \mathcal{U}(\tau, 0) \\ \Leftrightarrow i[(\partial_\tau \mathcal{P}_\tau) \mathcal{U}(\tau, 0) + \mathcal{P}_\tau (\partial_\tau \mathcal{U}(\tau, 0))] &= [\mathcal{H}(\tau) + \mathcal{H}_0(\tau)] \mathcal{P}_\tau \mathcal{U}(\tau, 0). \end{aligned}$$

Da der Puls die Schrödingergleichung

$$i\partial_\tau \mathcal{P}_\tau = \mathcal{H}_0(\tau) \mathcal{P}_\tau \quad (2.21)$$

erfüllt, und damit gemäß Abschnitt A.1 einen Zusammenhang zwischen  $\vec{a}(t)$ ,  $\vec{v}(t)$  und  $\psi(t)$  einführt, ergibt sich so eine Schrödingergleichung für den freien Korrekturterm  $\mathcal{U}(\tau, 0)$

$$\begin{aligned} i[(\partial_\tau \mathcal{P}_\tau) \mathcal{U}(\tau, 0) + \mathcal{P}_\tau (\partial_\tau \mathcal{U}(\tau, 0))] &= [\mathcal{H}(\tau) + \mathcal{H}_0(\tau)] \mathcal{P}_\tau \mathcal{U}(\tau, 0) \\ \Leftrightarrow i\mathcal{P}_\tau \partial_\tau \mathcal{U}(\tau, 0) &= \mathcal{H}(\tau) \mathcal{P}_\tau \mathcal{U}(\tau, 0) \\ \Leftrightarrow i\partial_\tau \mathcal{U}(\tau, 0) &= \underbrace{\mathcal{P}_\tau^{-1} \mathcal{H}(\tau) \mathcal{P}_\tau}_{\tilde{\mathcal{H}}(\tau)} \mathcal{U}(\tau, 0). \end{aligned}$$

Formal wird diese SGL für den mit dem gemachten Ansatz nötigen Korrekturterm  $\mathcal{U}(\tau, 0)$  durch

$$\mathcal{U}(\tau_p, 0) = \mathcal{T} \left\{ e^{-i \int_0^{\tau_p} \tilde{\mathcal{H}}(t) dt} \right\} \quad (2.22)$$

gelöst.

Mit den expliziten Repräsentationen

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_t &= \cos\left(\frac{\psi(t)}{2}\right) - i(\vec{\sigma}\vec{a}(t)) \sin\left(\frac{\psi(t)}{2}\right) \\ \mathcal{P}_t^{-1} &= \cos\left(\frac{\psi(t)}{2}\right) + i(\vec{\sigma}\vec{a}(t)) \sin\left(\frac{\psi(t)}{2}\right)\end{aligned}$$

folgt für  $\tilde{\mathcal{H}}(\tau)$  mit der in Abschnitt A.3 gezeigten Rechnung bei ausgelassenen Zeitabhängigkeiten  $\psi(t)$ ,  $\vec{a}(t)$  und  $\vec{\eta}(t)$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}(\tau) &= \mathcal{P}_\tau^{-1}\mathcal{H}(\tau)\mathcal{P}_\tau \\ &\vdots \\ &= \cos(\psi) \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{\eta}) - \sin(\psi) \cdot \vec{\sigma} \cdot [\vec{a} \times \vec{\eta}] + 2 \cdot \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \cdot (\vec{\eta} \cdot \vec{a}) \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{a}) \\ &= [\cos(\psi) \cdot \vec{\eta} - \sin(\psi) \cdot [\vec{a} \times \vec{\eta}] + (1 - \cos(\psi)) \cdot (\vec{\eta} \cdot \vec{a}) \cdot \vec{a}] \cdot \vec{\sigma}.\end{aligned}\quad (2.23)$$

Anschaulich ist  $\tilde{\mathcal{H}}(\tau) = \mathcal{P}_\tau^{-1}\mathcal{H}(\tau)\mathcal{P}_\tau$  ein mit  $\mathcal{P}_\tau$  rotierter Operator  $\mathcal{H}(\tau)$  und kann folglich mit Hilfe einer expliziten Drehmatrix dargestellt werden. Analoges gilt für die Rotation des Paulimatrixvektors  $\vec{\sigma}$  gemäß  $\vec{\mathcal{S}}(\tau) = \mathcal{P}_\tau^{-1}\vec{\sigma}\mathcal{P}_\tau = \mathcal{D}_{\vec{a}}(\psi) \cdot \vec{\sigma}$  mit  $\mathcal{D}_{\vec{a}}(\psi)$  als dreidimensionale Drehmatrix um den effektiven Winkel  $\psi$  und mit der effektiven Drehachse  $\vec{a}$ . Damit und mit der Rotationsinvarianz des Skalarprodukts lässt sich  $\tilde{\mathcal{H}}(\tau)$  auch als

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}(\tau) &= \mathcal{P}_\tau^{-1}\mathcal{H}(\tau)\mathcal{P}_\tau := \vec{\mathcal{S}} \cdot \vec{\eta} \\ &= [\mathcal{D}_{\vec{a}}(\psi) \cdot \vec{\sigma}] \cdot \vec{\eta} \\ &= [\mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi) \cdot \vec{\eta}] \cdot \vec{\sigma} \\ &:= \vec{n}_{\vec{\eta}}(t) \cdot \vec{\sigma}\end{aligned}\quad (2.24)$$

schreiben. Durch den Vergleich mit dem zuvor berechneten Ausdruck (2.23) kann gemäß

$$\vec{n}_{\vec{\eta}} = \cos(\psi) \cdot \vec{\eta} - \sin(\psi) \cdot [\vec{a} \times \vec{\eta}] + (1 - \cos(\psi)) \cdot (\vec{\eta} \cdot \vec{a}) \cdot \vec{a}\quad (2.25)$$

eine explizite Repräsentation der Drehmatrix  $\mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi)$  gefunden werden. Es ergibt sich die in (A.3) gezeigte Matrix  $\mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi)$ .

Von Interesse ist die zeitliche Evolution des Systems während der kurzen Pulsdauer

$\tau_p$ . Es gilt insbesondere  $\lim_{\tau_p \rightarrow 0} \|\mathcal{H}\|_{\tau_p} = 0$  während  $\lim_{\tau_p \rightarrow 0} \|\mathcal{H}_0\|_{\tau_p}$  konstant endlich bleibt, da  $\mathcal{H}_0$  gemäß (2.20) effektiv eine Rotation um den endlichen Winkel  $\psi(\tau_p)$  während der Pulsdauer  $\tau_p$  vermitteln soll. Das motiviert die Annahme, dass  $\|\mathcal{H}\|_{\tau_p} \ll \|\mathcal{H}_0\|_{\tau_p}$  gilt, sodass für kurze Pulslängern  $\tau_p$  eine Entwicklung von Gleichung (2.22) in Potenzen von  $\|\mathcal{H}\|_{\tau_p}$  vorgenommen werden kann. Eine komfortable Möglichkeit diese Entwicklung vorzunehmen ist für den hier betrachteten Fall die Magnus-Entwicklung [Mag54]

$$\mathcal{U}(\tau_p, 0) = \exp \left[ -i \left( \underbrace{\int_0^{\tau_p} \tilde{\mathcal{H}}_t dt}_{\mu^{(1)}} - \frac{i}{2} \underbrace{\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} [\tilde{\mathcal{H}}_{t_1}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_2}] dt_2 dt_1}_{\mu^{(2)}} + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{6} \underbrace{\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [[\tilde{\mathcal{H}}_{t_1}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_2}], \tilde{\mathcal{H}}_{t_3}] + [\tilde{\mathcal{H}}_{t_1}, [\tilde{\mathcal{H}}_{t_2}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_3}]] dt_3 dt_2 dt_1 + \dots}_{\mu^{(3)}} \right) \right], \quad (2.26)$$

wobei  $\tilde{\mathcal{H}}(t_i) = \mathcal{H}_{t_i}$  eingeführt wurde. Für jeden Summanden  $\mu^{(i)}$  in dieser Entwicklung gilt  $\mu^{(i)} \propto (\|\mathcal{H}\|_{\tau_p})^i$ .

In voller, symmetrielooser Allgemeinheit ergeben sich für die ersten Summanden  $\mu^{(1)}$ ,  $\mu^{(2)}$  und  $\mu^{(3)}$  gemäß Gleichung (2.26) mit  $\tilde{\mathcal{H}}$  aus Gleichung (2.24) die folgenden Repräsentationen.

**In erster Ordnung** ergibt sich

$$\begin{aligned} \mu^{(1)} &= \int_0^{\tau_p} \tilde{\mathcal{H}}_t dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \vec{n}_{\vec{\eta}}(t) \vec{\sigma} dt. \end{aligned} \quad (2.27)$$

**In zweiter Ordnung** folgt

$$\begin{aligned}
\mu^{(2)} &= \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} [\tilde{\mathcal{H}}_{t_1}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_2}] dt_2 dt_1 \\
&= \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} [\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{\sigma}, \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \vec{\sigma}] dt_2 dt_1 \\
&= \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} [(\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{\sigma}) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \vec{\sigma}) - (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \vec{\sigma}) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{\sigma})] dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Mit  $(\vec{a} \cdot \vec{\sigma}) \cdot (\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$  gilt

$$= \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \underbrace{[\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1), \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)]}_0 + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) - \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1)) dt_2 dt_1$$

und mit der Antilinearität des Kreuzprodukts ergibt sich

$$= 2i \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \vec{\sigma} (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)) dt_2 dt_1,$$

also schließlich

$$\mu^{(2)} = 2i\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)) dt_2 dt_1. \quad (2.28)$$

**In dritter Ordnung** folgt so

$$\begin{aligned}
\mu^{(3)} &= \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [[\tilde{\mathcal{H}}_{t_1}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_2}], \tilde{\mathcal{H}}_{t_3}] + [\tilde{\mathcal{H}}_{t_1}, [\tilde{\mathcal{H}}_{t_2}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_3}]] dt_3 dt_2 dt_1 \\
&= \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [[\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{\sigma}, \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \vec{\sigma}], \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \vec{\sigma}] \\
&\quad + [\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{\sigma}, [\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \vec{\sigma}, \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \vec{\sigma}]] dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Nach einer längeren, im Abschnitt A.4 explizit gezeigten und daher hier nur angedeuteten, Rechnung ergibt sich so mit Rückgriff auf Gleichung (2.28) in dritter

Ordnung

$$\begin{aligned}
\mu^{(3)} &= 2i \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \{ [\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{\sigma}, \vec{\sigma} (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3))] \\
&\quad + [\vec{\sigma} (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)), \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \vec{\sigma}] \} dt_3 dt_2 dt_1 \\
&\quad \vdots \\
&= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \{ \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \times (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3)) \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \times (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)) \} dt_3 dt_2 dt_1 \\
&\quad \vdots \\
&= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [2\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3)) + \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)) + \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2))] dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Schließlich gilt also

$$\begin{aligned}
\mu^{(3)} &= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad [2\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3)) + \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)) + \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2))] \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Aus diesen allgemeinen Ausdrücken können mit  $\mathcal{E} \{ \mu^{(1)} \}$ ,  $\mathcal{E} \{ \mu^{(2)} \}$  und  $\mathcal{E} \{ \mu^{(3)} \}$  spezifische Ausdrücke für die konkret betrachteten Eigenschaften des Rauschens gefunden werden. Dazu werden, wie in den folgenden Kapiteln, die in den Summanden auftretenden Ausdrücke  $\mathcal{E} \{ \eta(t_1) \}$ ,  $\mathcal{E} \{ \eta(t_1) \eta(t_2) \}$  und  $\mathcal{E} \{ \eta(t_1) \eta(t_2) \eta(t_3) \}$  entsprechend der zuvor diskutierten statistischen Größen ersetzt.

## 3. Reine Dephasierung

Die Wahl des, das Bad modellierenden,  $\vec{\eta}(t)$  zusammen mit der Wahl zugelassener effektiver Drehachsen  $\vec{a}(t)$  für  $0 < t < \tau_p$  bestimmt, welche Matrixelemente aus der Drehmatrix  $\mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi)$  verschwinden oder zu den Bedingungen beitragen, siehe expliziten Ausdruck der Drehmatrix (A.3). Gemäß  $\vec{n}_{\vec{\eta}}(t) = \mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi) \cdot \vec{\eta}(t)$ , siehe Gleichung (2.25), ergeben sich so zusammen mit den Gleichungen (2.27), (2.28) und (2.29) aus der Magnus-Entwicklung und den statistischen Eigenschaften der beteiligten Zufallsprozesse, siehe Gleichungen (2.10) und (2.12), die zu erfüllenden Bedingungen.

Für den Fall, dass reine Dephasierung modelliert werden soll gilt

$$\vec{\eta}(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \eta(t) \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

das klassische Bad koppelt also lediglich an die  $z$ -Komponente des Spins.

### 3.1. Amplitudenmodulation

Für die Amplitudenmodulation soll nur eine feste Rotationsachse

$$\vec{a}(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

zugelassen werden. Mit der Wahl dieser Rotationsachse vereinfacht sich das gekoppelte Differentialgleichungssystem (A.2) mit  $\vec{v} = v(t) \cdot (0, 1, 0)^T$  und durch eine Multiplikation

mit  $\vec{a} = (0, 1, 0)^T$  zu

$$\begin{aligned}\psi'(t) &= 2v(t) \\ \Rightarrow \psi(\tau_p) &= 2 \int_0^{\tau_p} v(t) dt\end{aligned}\tag{3.3}$$

mit  $\psi(0) = 0$ .

Mit diesen Voraussetzungen lassen sich die zuvor für den allgemeinsten Fall hergeleiteten Gleichungen auf die folgenden Ergebnisse spezialisieren.

**In erster Ordnung in  $\tau_p$**  ergibt sich mit den Gleichungen (3.1) und (3.2) so aus dem ersten Term der Magnus-Entwicklung im allgemeinen Fall, siehe Gleichung (2.27),

$$\begin{aligned}\mu^{(1)} &= \int_0^{\tau_p} \vec{n}_{\bar{\eta}}(t) \vec{\sigma} dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \begin{pmatrix} -\sin(\psi(t)) \eta(t) \\ 0 \\ \cos(\psi(t)) \eta(t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} dt \\ &= \sigma_z \int_0^{\tau_p} \eta(t) \cos(\psi(t)) dt - \sigma_x \int_0^{\tau_p} \eta(t) \sin(\psi(t)) dt.\end{aligned}$$

Zusammen mit dem Erwartungswert nach Gleichung (2.10) ergibt sich dann

$$\mu^{(1)} = \sigma_z \bar{\eta} \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt - \sigma_x \bar{\eta} \int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt.\tag{3.4}$$

**In zweiter Ordnung in  $\tau_p$**  ergibt sich mit den Gleichungen (3.1) und (3.2) so aus dem

zweiten Term der Magnus-Entwicklung im allgemeinen Fall, siehe Gleichung (2.28),

$$\begin{aligned}
\mu^{(2)} &= 2i\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} (\vec{n}_{\bar{\eta}}(t_1) \times \vec{n}_{\bar{\eta}}(t_2)) dt_2 dt_1 \\
&= 2i\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \begin{pmatrix} -\sin(\psi(t_1))\eta(t_1) \\ 0 \\ \cos(\psi(t_1))\eta(t_1) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\sin(\psi(t_2))\eta(t_2) \\ 0 \\ \cos(\psi(t_2))\eta(t_2) \end{pmatrix} dt_2 dt_1 \\
&= 2i\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \eta(t_1)\eta(t_2) \\
&\quad \begin{pmatrix} 0 \\ \sin(\psi(t_1))\cos(\psi(t_2)) - \cos(\psi(t_1))\sin(\psi(t_2)) \\ 0 \end{pmatrix} \\
&\quad dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Mit  $\sin\alpha\cos\beta - \sin\beta\cos\alpha = \sin(\alpha - \beta)$  folgt dann

$$= 2i\sigma_y \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \eta(t_1)\eta(t_2)\sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) dt_2 dt_1$$

was mit der Taylorentwicklung für die Autokorrelationsfunktion gemäß Gleichung (2.13) in zweiter Ordnung in  $\tau_p$  schließlich auf

$$\mu^{(2)} = 2i\sigma_y (\bar{\eta}^2 + \sigma^2) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) dt_2 dt_1 \quad (3.5)$$

**In dritter Ordnung in  $\tau_p$**  ergibt sich mit den Gleichungen (3.1) und (3.2) so aus dem dritten Term der Magnus-Entwicklung im allgemeinen Fall, siehe Gleichung (2.29),

bei  $\psi(t_i) := \psi_i$

$$\begin{aligned}
\mu^{(3)} &= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad [2\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3)) + \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)) + \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2))] \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1 \\
&= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \eta(t_1) \eta(t_2) \eta(t_3) \\
&\quad \left[ \begin{aligned}
&2 \begin{pmatrix} -\sin(\psi_2) \\ 0 \\ \cos(\psi_2) \end{pmatrix} (\cos(\psi_1) \cos(\psi_3) + \sin(\psi_1) \sin(\psi_3)) \\
&- \begin{pmatrix} -\sin(\psi_3) \\ 0 \\ \cos(\psi_3) \end{pmatrix} (\cos(\psi_1) \cos(\psi_2) + \sin(\psi_1) \sin(\psi_2)) \\
&- \begin{pmatrix} -\sin(\psi_1) \\ 0 \\ \cos(\psi_1) \end{pmatrix} (\cos(\psi_3) \cos(\psi_2) + \sin(\psi_3) \sin(\psi_2)) \end{aligned} \right] \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Mit  $\sin \alpha \sin \beta + \cos \alpha \cos \beta = \cos (\alpha - \beta)$  ergibt sich daraus

$$\begin{aligned}
&= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \eta(t_1) \eta(t_2) \eta(t_3) \\
&\quad \left[ \begin{aligned} &2 \begin{pmatrix} -\sin(\psi_2) \\ 0 \\ \cos(\psi_2) \end{pmatrix} \cos(\psi_1 - \psi_3) \\ &- \begin{pmatrix} -\sin(\psi_3) \\ 0 \\ \cos(\psi_3) \end{pmatrix} \cos(\psi_1 - \psi_2) \\ &- \begin{pmatrix} -\sin(\psi_1) \\ 0 \\ \cos(\psi_1) \end{pmatrix} \cos(\psi_3 - \psi_2) \end{aligned} \right] \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Mit den verwendeten Additionstheoremen  $\sin \alpha \cos \beta = \frac{1}{2} (\sin(\alpha - \beta) + \sin(\alpha + \beta))$  und  $\cos \alpha \cos \beta = \frac{1}{2} (\cos(\alpha - \beta) + \cos(\alpha + \beta))$  führt das auf

$$\begin{aligned}
&= -2\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \eta(t_1) \eta(t_2) \eta(t_3) \\
&\quad \left[ \begin{aligned} &2 \begin{pmatrix} -\sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \\ 0 \\ \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) + \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \end{pmatrix} \\ &- \begin{pmatrix} -\sin(\psi_3 - \psi_1 + \psi_2) - \sin(\psi_3 + \psi_1 - \psi_2) \\ 0 \\ \cos(\psi_3 - \psi_1 + \psi_2) + \cos(\psi_3 + \psi_1 - \psi_2) \end{pmatrix} \\ &- \begin{pmatrix} -\sin(\psi_1 - \psi_3 + \psi_2) - \sin(\psi_1 + \psi_3 - \psi_2) \\ 0 \\ \cos(\psi_1 - \psi_3 + \psi_2) + \cos(\psi_1 + \psi_3 - \psi_2) \end{pmatrix} \end{aligned} \right] \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Kürzen von sich gegenseitig weghebenden Summanden führt dann auf

$$\begin{aligned}
&= -2 \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \eta(t_1) \eta(t_2) \eta(t_3) \\
&\quad \begin{pmatrix} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \\ 0 \\ -2 \cos(\psi_1 + \psi_3 - \psi_2) + \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) + \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \end{pmatrix} \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Zusammen mit dem aus dem Isserli- bzw. Wick-Theorem als Gleichung (2.11) gefundenen und der Taylorentwicklung für die auftretenden Autokorrelationsfunktionen gemäß (2.13) ergibt sich in dritter Ordnung in  $\tau_p$  schließlich

$$\begin{aligned}
\mu^{(3)} &= -2 \left( \bar{\eta}^3 + 3\sigma\bar{\eta} \right) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad (2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3)) \sigma_x \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1 \\
&\quad + 2 \left( \bar{\eta}^3 + 3\sigma\bar{\eta} \right) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad (2 \cos(\psi_1 + \psi_3 - \psi_2) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3)) \sigma_z \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned} \tag{3.6}$$

### 3.1.1. Kontinuierliche Pulse

Für kontinuierliche Pulse wird die Pulsform  $v(t)$  als Fourierreihe angesetzt. Die Koeffizienten der Fourierreihen werden dabei so gewählt, dass die Ansätze bei gefordertem effektiven Rotationswinkel  $\psi(\tau_p) = \chi$  stets

$$\begin{aligned}
v(0) &= v(\tau_p) = 0 \\
v'(0) &= v'(\tau_p) = 0 \\
2 \int_0^{\tau_p} v(t) dt &= \chi
\end{aligned} \tag{3.7}$$

erfüllen. Abhängig von der Anzahl der in der untersuchten Ordnung zu erfüllenden Einschränkungen werden so Fourier-Terme aufsummiert. Wird außerdem eine zeitliche Symmetrie benötigt, beschränken sich die Fourieransätze auf Summen aus cos-Termen und garantieren so die erwünschte Symmetrie.

### 3.1.1.1. Pulse in erster Ordnung

Neben den durch die folgenden Ansätze automatisch erfüllten Forderungen aus den Gleichungen (3.7) müssen Pulse erster Ordnung die Bedingungen

$$\int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.4) erfüllen.

#### $\pi$ -Pulse

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \pi$  erfüllenden, asymmetrischen Ansatz

$$v(t) = \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - a \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) + b \sin\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{b}{2} \sin\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \quad (3.8)$$

müssen dann nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  die einheitenlosen Gleichungen

$$\int_0^1 \cos(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0, \quad (3.9)$$

wobei  $\psi(x)$  gemäß Gleichung (3.3) mit der gleichen Substitution gegeben ist, erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der Software “SciPy”, für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.5, wurde so der Puls “1-PI-ASYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.1 geplottet, Tabelle 3.1 zeigt

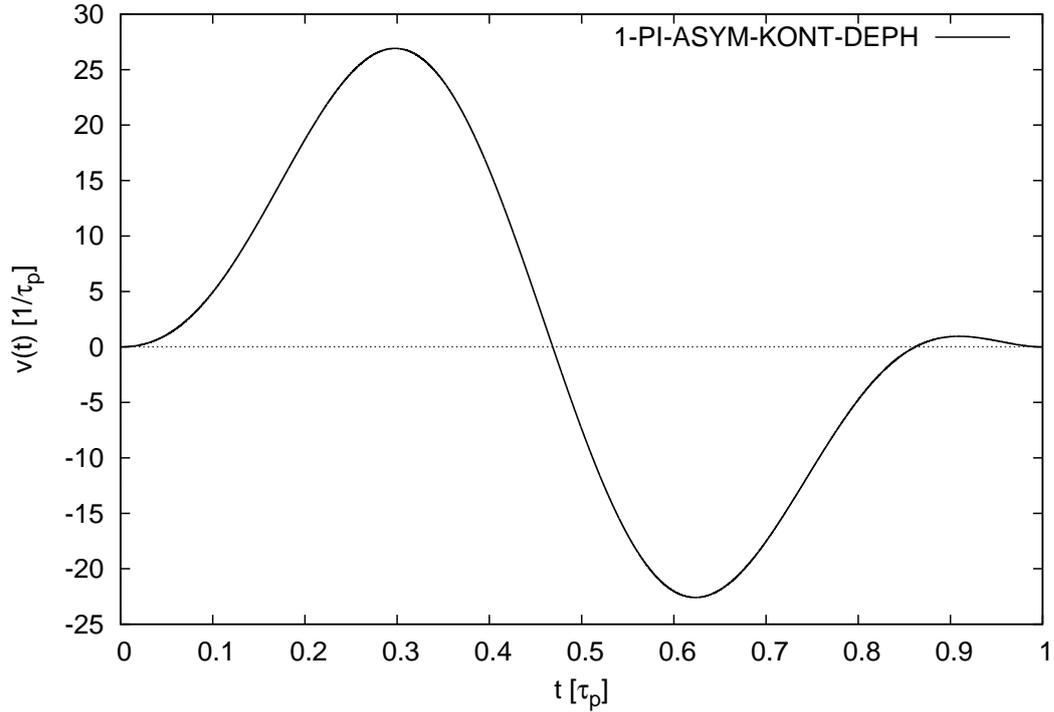


Abbildung 3.1.: Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen  $\pi$ -Pulses erster Ordnung 1-PI-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.8)

die Parametrierung dieses Pulses. Dieser Puls ist wie erwartet eine Reproduktion des kontinuierlichen  $\pi$ -Pulses erster Ordnung bei statischer, quantenmechanischer Dephasierung [PKRU09].

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \pi$  erfüllenden, symmetrischen Ansatz

$$v(t) = \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - a \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \quad (3.10)$$

vereinfachen sich die Bedingungen erheblich. Für das aus diesem bezüglich der Intervallmitte  $\frac{\tau_p}{2}$  symmetrischen Ansatz resultierende  $\tilde{\psi}(t) = \psi(t) - \frac{\pi}{2}$  mit  $\tilde{\psi}(0) = -\frac{\pi}{2}$  und  $\tilde{\psi}(\tau_p) = \frac{\pi}{2}$  besitzt eine Punktsymmetrie um diese Intervallmitte und es

gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \cos\left(\tilde{\psi}(t) + \frac{\pi}{2}\right) dt \end{aligned}$$

Mit dem Additionstheorem  $\cos(\alpha + \beta) = \cos\alpha \cos\beta - \sin\alpha \sin\beta$  ergibt sich

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau_p} \cos\left(\tilde{\psi}(t) + \frac{\pi}{2}\right) dt \\ &= \int_0^{\tau_p} -\sin(\tilde{\psi}(t)) dt. \end{aligned}$$

Da diese sin-Funktion eine Punktsymmetrie gegenüber  $n\pi$  für  $n \in \mathbb{Z}$  und  $\tilde{\psi}\left(\frac{\tau_p}{2}\right) = 0 = 0\pi$  gilt weist der Integrand als Verkettung zweier punktsymmetrischer Funktionen um die Intervallmitte ebenfalls eine Punktsymmetrie um die Intervallmitte auf. Deshalb muss dieses Integral unabhängig von der Wahl der Parameter  $a$  und  $b$  verschwinden und stellt so keine zu erfüllende Beschränkung mehr dar. Deshalb muss nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  in erster Ordnung lediglich die einheitenlose Gleichung

$$\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0, \quad (3.11)$$

wobei  $\psi(x)$  gemäß Gleichung (3.3) mit der gleichen Substitution gegeben ist, erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der Software “SciPy”, für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.5, wurde so der Puls “1-PI-SYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.2 geplottet, Tabelle 3.1 zeigt die Parametrierung dieses Pulses. Es handelt sich bei diesem Puls wie erwartet um eine Reproduktion des kontinuierlichen  $\pi$ -Pulses erster Ordnung bei statischer, quantenmechanischer Dephasierung [PKRU09].

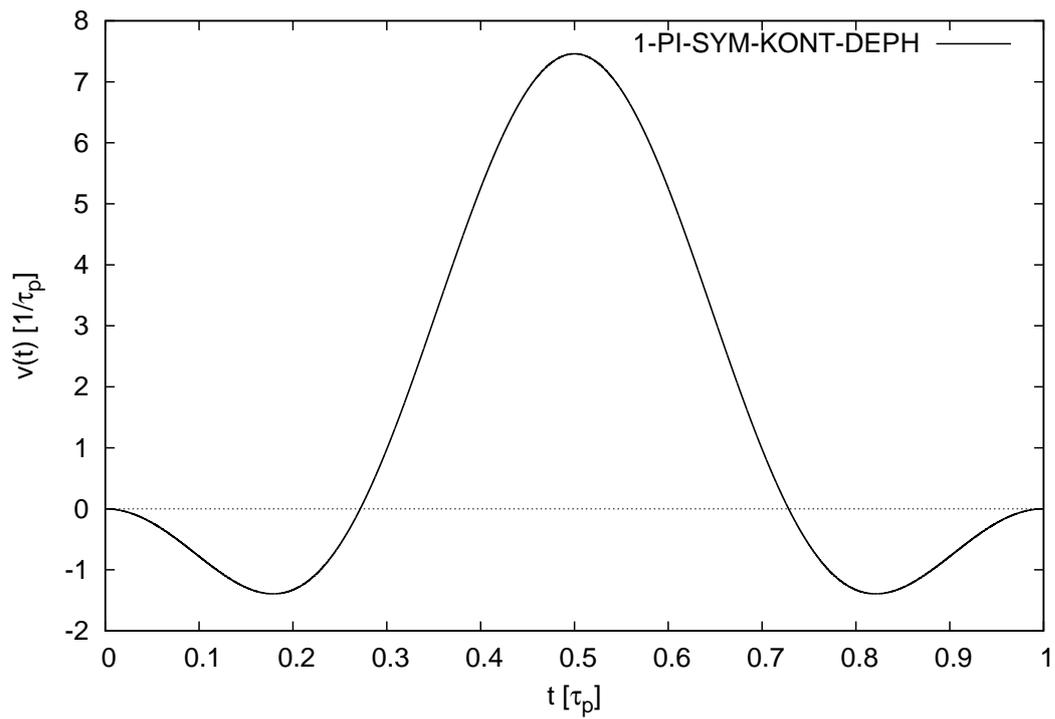


Abbildung 3.2.: Plot des kontinuierlichen, symmetrischen  $\pi$ -Pulses erster Ordnung 1-PI-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.10)

## $\frac{\pi}{2}$ -Pulse

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllenden, asymmetrischen Ansatz

$$v(t) = \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - a \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) + b \sin\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{b}{2} \sin\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \quad (3.12)$$

müssen dann nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  die einheitenlosen Gleichungen

$$\int_0^1 \cos(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0, \quad (3.13)$$

wobei  $\psi(x)$  gemäß Gleichung (3.3) mit der gleichen Substitution gegeben ist, erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der Software “SciPy”, für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.5, wurde so der Puls “1-PI2-ASYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.3 geplottet, Tabelle 3.1 zeigt die Parametrierung dieses Pulses. Dieser Puls ist wie erwartet eine Reproduktion des kontinuierlichen  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses erster Ordnung bei statischer, quantenmechanischer Dephasierung [PKRU09].

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllenden, symmetrischen Ansatz

$$v(t) = \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - a \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \quad (3.14)$$

vereinfachen sich die Bedingungen erneut erheblich. Für das aus diesem bezüglich der Intervallmitte  $\frac{\tau_p}{2}$  symmetrischen Ansatz resultierende  $\tilde{\psi}(t) = \psi(t) - \frac{\pi}{4}$  mit  $\tilde{\psi}(0) = -\frac{\pi}{4}$  und  $\tilde{\psi}(\tau_p) = \frac{\pi}{4}$  besitzt eine Punktsymmetrie um diese Intervallmitte

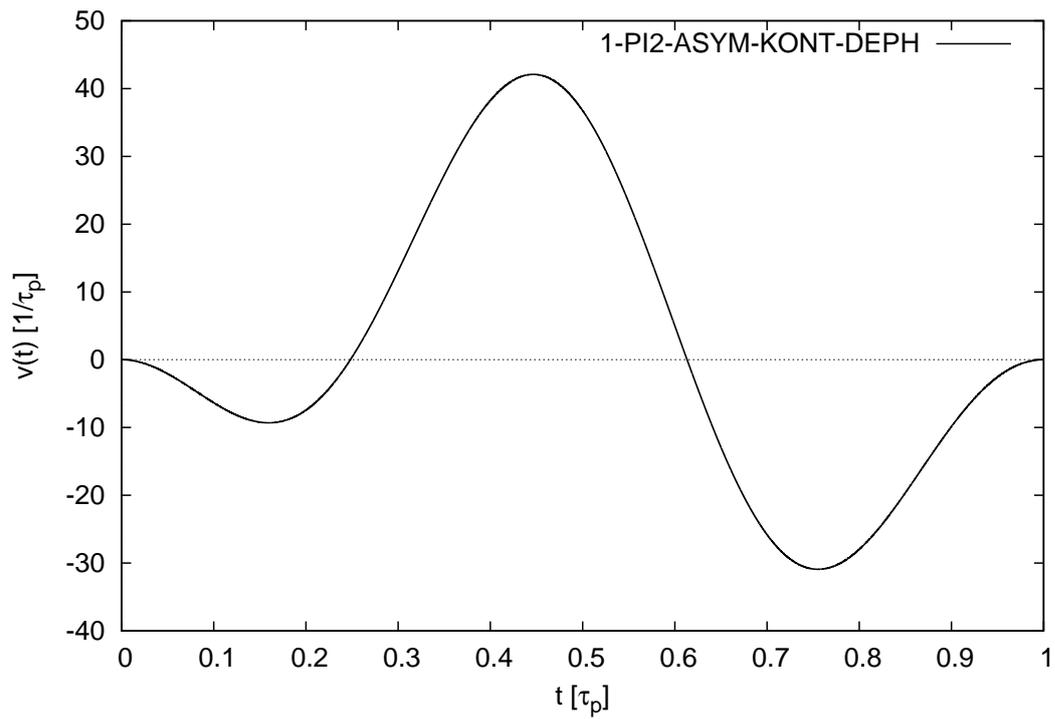


Abbildung 3.3.: Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses erster Ordnung 1-PI2-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.12)

und es gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \cos\left(\tilde{\psi}(t) + \frac{\pi}{4}\right) dt \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \sin\left(\tilde{\psi}(t) + \frac{\pi}{4}\right) dt. \end{aligned}$$

Mit den Additionstheoremen  $\sin(\alpha + \beta) = \sin \alpha \cos \beta + \sin \beta \cos \alpha$  und  $\cos(\alpha + \beta) = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta$  ergibt sich

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau_p} \cos\left(\tilde{\psi}(t) + \frac{\pi}{4}\right) dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \cos(\tilde{\psi}(t)) \frac{1}{\sqrt{2}} - \sin(\tilde{\psi}(t)) \frac{1}{\sqrt{2}} dt \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau_p} \sin\left(\tilde{\psi}(t) + \frac{\pi}{4}\right) dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \sin(\tilde{\psi}(t)) \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\tilde{\psi}(t)) dt. \end{aligned}$$

Da die auftretenden sin-Funktion eine Punktsymmetrie gegenüber  $n\pi$  für  $n \in \mathbb{Z}$  und  $\tilde{\psi}\left(\frac{\tau_p}{2}\right) = 0 = 0\pi$  gilt, weisen diese Integranden als Verkettung zweier punktsymmetrischer Funktionen um die Intervallmitte ebenfalls eine Punktsymmetrie um die Intervallmitte auf. Deshalb verschwinden diese Integrale unabhängig von

der Wahl des Parameters  $a$ . So bleibt schließlich

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau_p} \cos(\tilde{\psi}(t)) \frac{1}{\sqrt{2}} - \sin(\tilde{\psi}(t)) \frac{1}{\sqrt{2}} dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \cos(\tilde{\psi}(t)) \frac{1}{\sqrt{2}} dt \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau_p} \sin(\tilde{\psi}(t)) \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\tilde{\psi}(t)) dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\tilde{\psi}(t)) dt. \end{aligned}$$

So resultiert eine freie Wahl zwischen beiden Einschränkungen und durch die Wahl für die zweite Einschränkung ergibt sich mit der erneuten Substitution  $t = x\tau_p$  die einheitenlose, zu erfüllende Gleichung

$$\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0, \quad (3.15)$$

wobei  $\psi(x)$  gemäß Gleichung (3.3) mit der gleichen Substitution gegeben ist. Mit Hilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der Software “SciPy”, für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.5, wurde so der Puls “1-PI2-SYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.4 geplottet, Tabelle 3.1 zeigt die Parametrierung dieses Pulses. Dieser Puls ist wie erwartet eine Reproduktion des kontinuierlichen  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses erster Ordnung bei statischer, quantenmechanischer Dephasierung [PKRU09].

### 3.1.1.2. Pulse in zweiter Ordnung

Neben den durch die folgenden Ansätze automatisch erfüllten Forderungen aus den Gleichungen (3.7) müssen Pulse zweiter Ordnung zusätzlich zu den Bedingungen

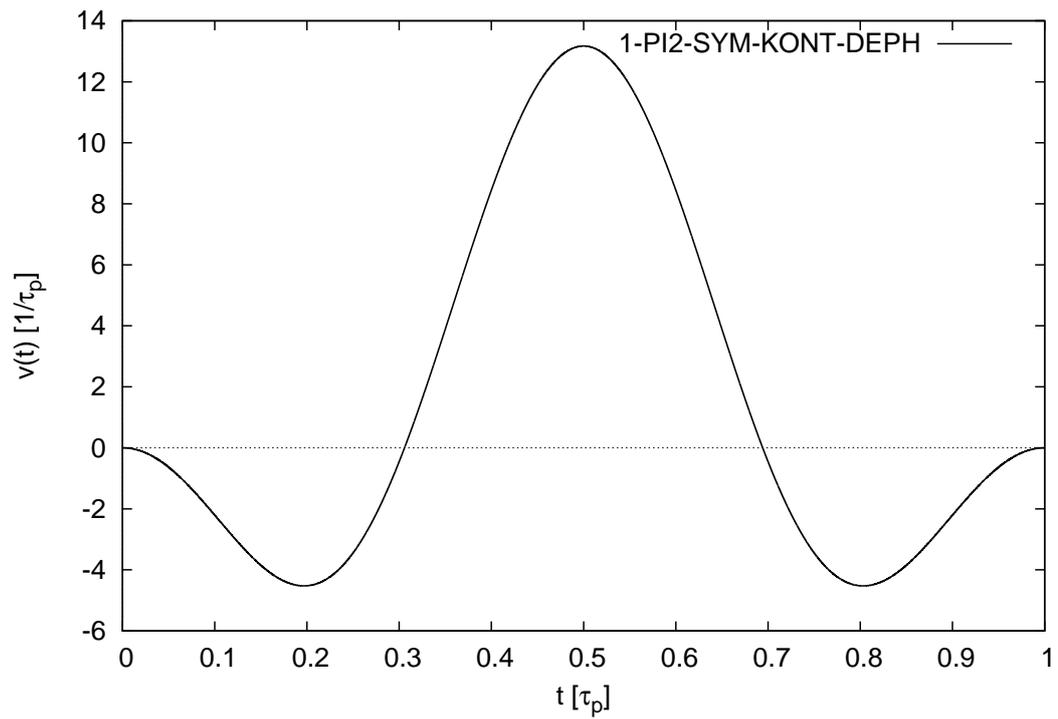


Abbildung 3.4.: Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses erster Ordnung 1-PI2-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.14)

1-PI-ASYM-KONT-DEPH	
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$
5.26302228	17.85053475
1-PI-SYM-KONT-DEPH	
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$
-2.15922393	n/a
1-PI2-ASYM-KONT-DEPH	
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$
-16.8093528	-15.63438951
1-PI-SYM-KONT-DEPH	
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$
-5.01558714	n/a

Tabelle 3.1.: Tabelle der Parametrierung von kontinuierlichen Lösungen erster Ordnung bei reiner Dephasierung

aus erster Ordnung

$$\int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.4) eine weitere Bedingung

$$\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.5) erfüllen.

### $\pi$ -Pulse

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \pi$  erfüllenden, asymmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
v(t) = & \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - a \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
& + b \sin\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{b}{2} \sin\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
& + c \sin\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{6}{8} c \sin\left(8\pi \frac{t}{\tau_p}\right)
\end{aligned} \tag{3.16}$$

müssen dann nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^1 \cos(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0,$$

wobei die auftretenden  $\psi(x_i)$  gemäß Gleichung (3.3) und der gleichen Substitution gegeben ist, erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der Software “SciPy”, für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.5, wurde so der Puls “2-PI-ASYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.5 geplottet, Tabelle 3.2 zeigt die Parametrierung dieses Pulses.

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \pi$  erfüllenden, symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned} v(t) = \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\ + (b - a) \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - b \cos\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \end{aligned} \quad (3.18)$$

müssen dann nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  und der selben Argumentation für die Vereinfachung der aus erster Ordnung resultierenden Einschränkungen die einheitenlosen Gleichungen

$$\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.19)$$

$$\int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0,$$

wobei die auftretenden  $\psi(x_i)$  gemäß Gleichung (3.3) und der gleichen Substitution gegeben ist, erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der Software “SciPy”, für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.5, wurde so der Puls “2-PI-SYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.6

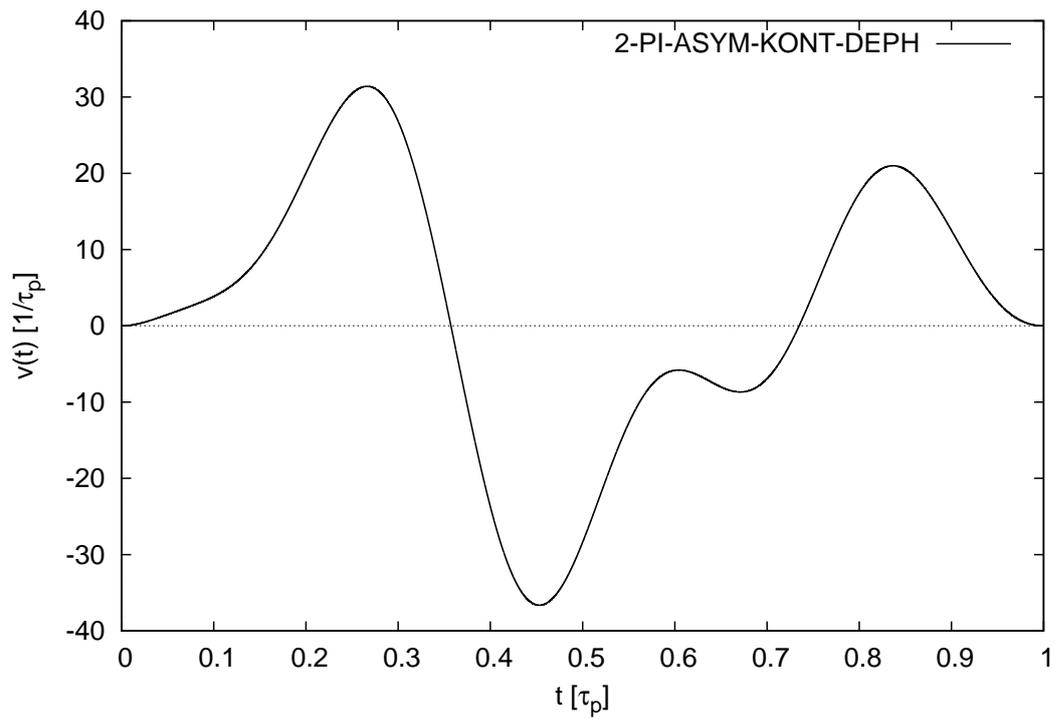


Abbildung 3.5.: Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen  $\pi$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.16)

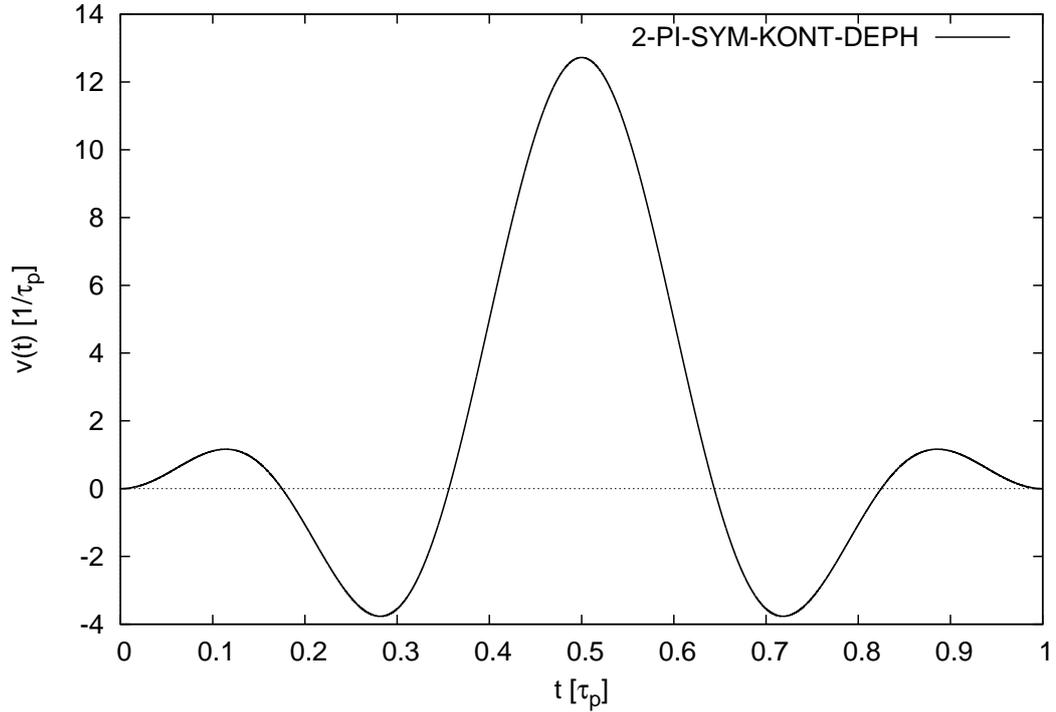


Abbildung 3.6.: Plot des kontinuierlichen, symmetrischen  $\pi$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.18)

geplottet, Tabelle 3.2 zeigt die Parametrierung dieses Pulses.

### $\frac{\pi}{2}$ -Pulse

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllenden, asymmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
 v(t) = & \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - a \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + b \sin\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{b}{2} \sin\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + c \sin\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{6}{8}c \sin\left(8\pi \frac{t}{\tau_p}\right)
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

müssen dann nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^1 \cos(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0,$$

wobei die auftretenden  $\psi(x_i)$  gemäß Gleichung (3.3) und der gleichen Substitution gegeben ist, erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der Software “SciPy”, für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.5, wurde so der Puls “2-PI2-ASYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.7 geplottet, Tabelle 3.2 zeigt die Parametrierung dieses Pulses.

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllenden, symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned} v(t) &= \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\ &+ (b - a) \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - b \cos\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

müssen dann nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  und der selben Argumentation für die Vereinfachung der aus erster Ordnung resultierenden Einschränkungen die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0, \end{aligned} \quad (3.23)$$

wobei die auftretenden  $\psi(x_i)$  gemäß Gleichung (3.3) und der gleichen Substitution gegeben ist, erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der Software “SciPy”, für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.5, wurde so der Puls “2-PI2-SYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.8

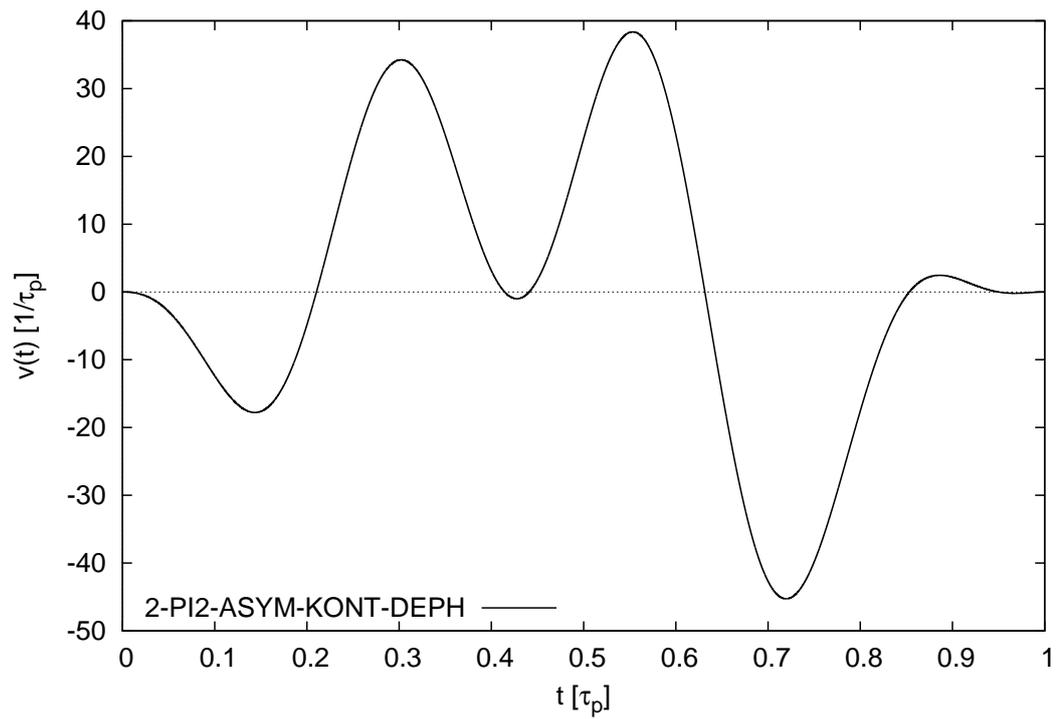


Abbildung 3.7.: Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.20)

geplottet, Tabelle 3.2 zeigt die Parametrierung dieses Pulses.

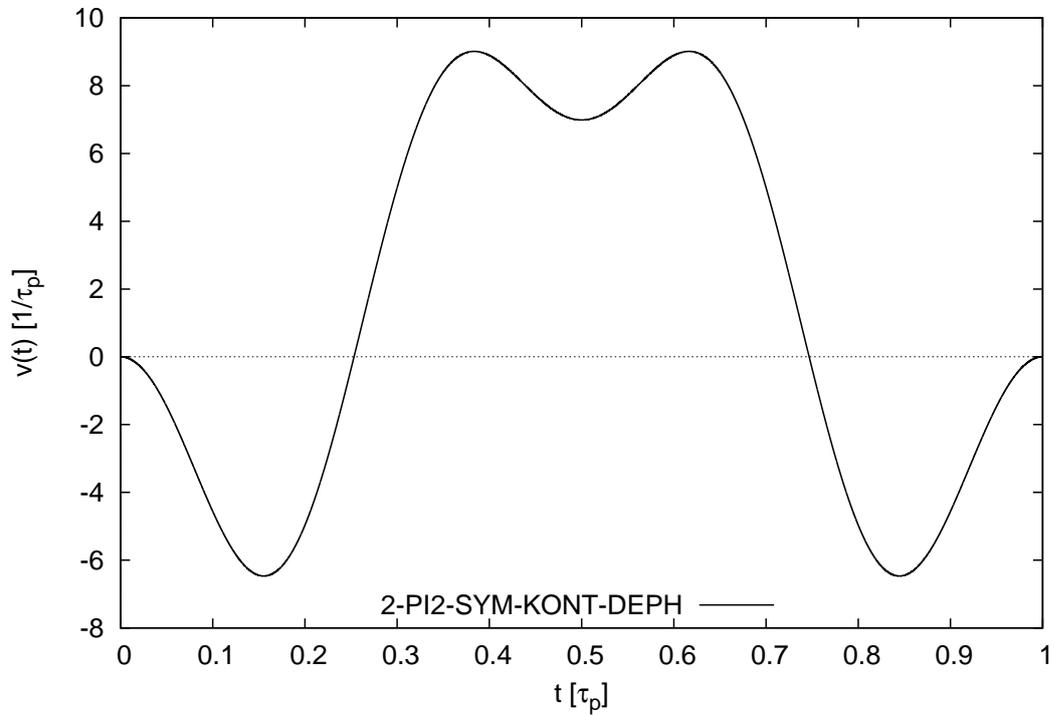


Abbildung 3.8.: Plot des kontinuierlichen, symmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.22)

### 3.1.1.3. Pulse in dritter Ordnung

Neben den durch die folgenden Ansätze automatisch erfüllten Forderungen aus den Gleichungen (3.7) müssen Pulse dritter Ordnung zusätzlich zu den Bedingungen

2-PI-ASYM-KONT-DEPH		
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$	$c$ in $\tau_p^{-1}$
15.76696999	3.80150158	-9.33217678
2-PI-SYM-KONT-DEPH		
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$	$c$ in $\tau_p^{-1}$
-1.92179255	2.86838351	n/a
2-PI2-ASYM-KONT-DEPH		
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$	$c$ in $\tau_p^{-1}$
-10.51544438	12.98073637	-17.1309684
2-PI2-SYM-KONT-DEPH		
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$	$c$ in $\tau_p^{-1}$
-5.41258549	-3.48909926	n/a

Tabelle 3.2.: Tabelle der Parametrierung von kontinuierlichen Lösungen erster Ordnung bei reiner Dephasierung

erster Ordnung

$$\int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.4) und der Bedingung zweiter Ordnung

$$\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.5) zusätzlich noch die Bedingungen dritter Ordnung

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
 & (2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3)) \\
 & dt_3 dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
 & \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
 & (2 \cos(\psi_1 + \psi_3 - \psi_2) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3)) \\
 & dt_3 dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0
 \end{aligned}$$

gemäß Gleichung (3.6) erfüllen.

## $\pi$ -Pulse

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \pi$  erfüllenden, asymmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
 v(t) = & \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) + (b - a) \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + (c - b) \cos\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - c \cos\left(8\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + d \sin\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{d}{2} \sin\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + e \sin\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{6}{8} e \sin\left(8\pi \frac{t}{\tau_p}\right)
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 \cos(\psi(x)) \, dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \sin(\psi(x)) \, dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) \, dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
& \quad - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \, dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \cos(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
& \quad - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \, dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0
\end{aligned} \tag{3.25}$$

erfüllt werden. Dabei sind die auftretenden  $\psi_i = \psi(x_i)$  gemäß Gleichung (3.3) und der gleichen Substitution gegeben. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und numerischen Integration aus der “GNU Scientific Library” (GSL), für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls “3-PI-ASYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.9 geplottet, Tabelle 3.3 zeigt die Parametrierung dieses Pulses.

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \pi$  erfüllenden, symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
v(t) = & \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) + (b - a) \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
& + (c - b) \cos\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) + (d - c) \cos\left(8\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
& - d \cos\left(10\pi \frac{t}{\tau_p}\right)
\end{aligned} \tag{3.26}$$

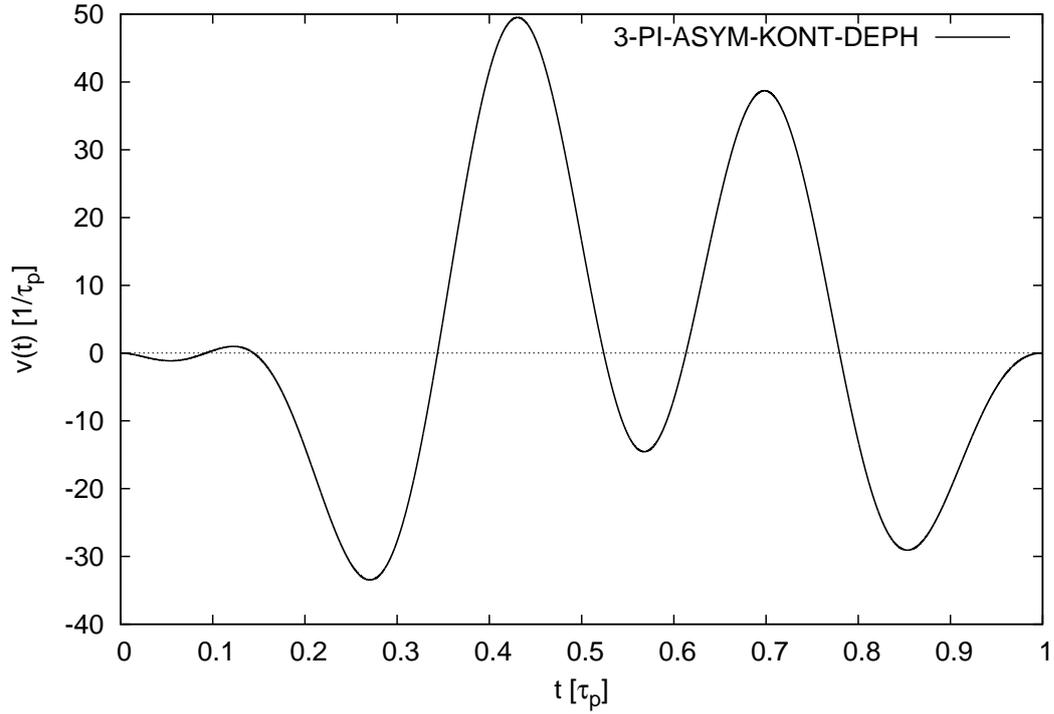


Abbildung 3.9.: Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen  $\pi$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.24)

müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
 & \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
 & \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
 & \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
 & \quad - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
 & \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \cos(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
 & \quad - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

erfüllt werden. Dabei sind die auftretenden  $\psi_i = \psi(x_i)$  gemäß Gleichung (3.3) und der gleichen Substitution gegeben. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und numerischen Integration aus der “GNU Scientific Library” (GSL), für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls “3-PI-SYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.10 geplottet, Tabelle 3.3 zeigt die Parametrierung dieses Pulses.

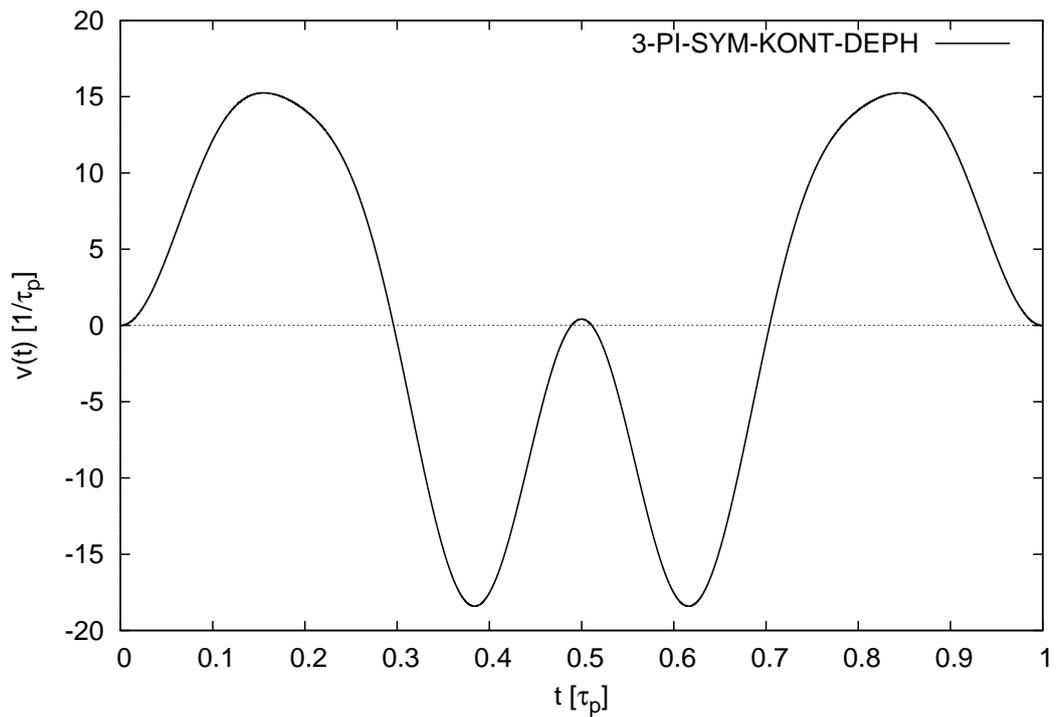


Abbildung 3.10.: Plot des kontinuierlichen, symmetrischen  $\pi$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.26)

## $\frac{\pi}{2}$ -Pulse

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllenden, asymmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
 v(t) = & \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) + (b - a) \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + (c - b) \cos\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - c \cos\left(8\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + d \sin\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{d}{2} \sin\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + e \sin\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) - \frac{6}{8}e \sin\left(8\pi \frac{t}{\tau_p}\right)
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
 & \int_0^1 \cos(\psi(x)) \, dx \stackrel{!}{=} 0 \\
 & \int_0^1 \sin(\psi(x)) \, dx \stackrel{!}{=} 0 \\
 & \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) \, dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
 & \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
 & \quad - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \, dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
 & \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \cos(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
 & \quad - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \, dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

erfüllt werden. Dabei sind die auftretenden  $\psi_i = \psi(x_i)$  gemäß Gleichung (3.3) und der gleichen Substitution gegeben. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und numerischen Integration aus der ‘‘GNU Scientific Library’’ (GSL), für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls ‘‘3-PI2-ASYM-KONT-DEPH’’ gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.11 geplottet, Tabelle 3.3 zeigt die Parametrierung dieses Pulses.

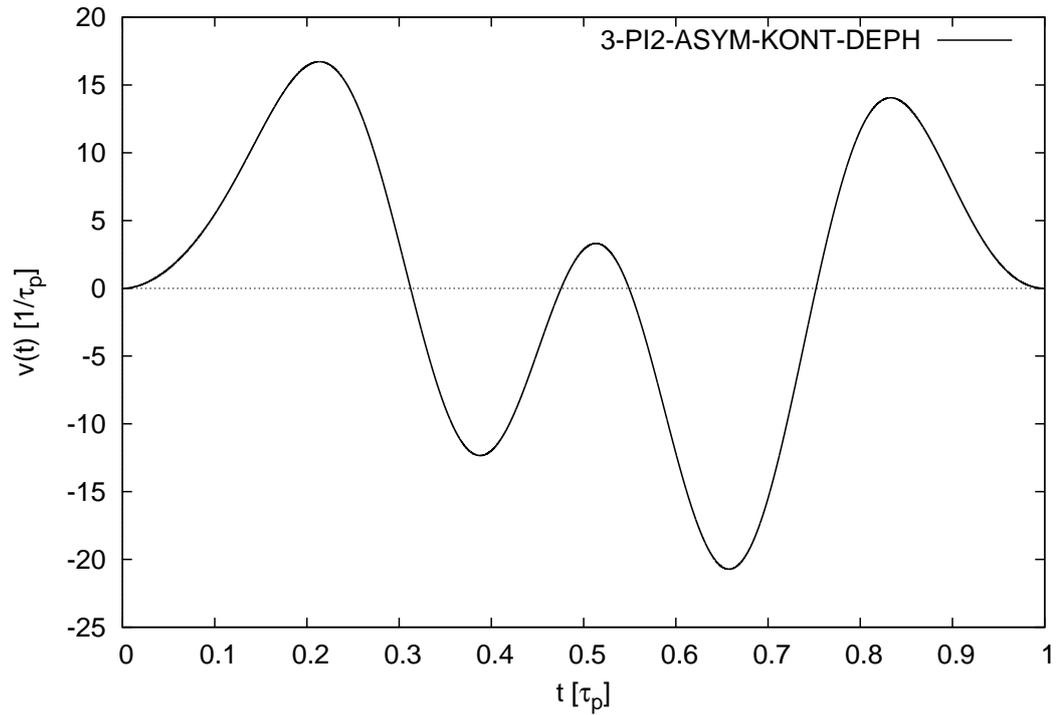


Abbildung 3.11.: Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI2-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.28)

Mit dem, die Gleichungen (3.7) mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllenden, symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
 v(t) = & \frac{\chi}{2} + \left(a - \frac{\chi}{2}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_p}\right) + (b - a) \cos\left(4\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & + (c - b) \cos\left(6\pi \frac{t}{\tau_p}\right) + (d - c) \cos\left(8\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \\
 & - d \cos\left(10\pi \frac{t}{\tau_p}\right)
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  mit  $x \in [0, 1]$  die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 \sin(\psi(x)) \, dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) \, dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
& \quad - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \, dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \cos(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
& \quad - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) \, dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0
\end{aligned} \tag{3.31}$$

erfüllt werden. Dabei sind die auftretenden  $\psi_i = \psi(x_i)$  gemäß Gleichung (3.3) und der gleichen Substitution gegeben. Mithilfe der Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und numerischen Integration aus der “GNU Scientific Library” (GSL), für eine genauere Beschreibung des Programmablaufs siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls “3-PI2-SYM-KONT-DEPH” gefunden. Dieser Puls ist in Abbildung 3.12 geplottet, Tabelle 3.3 zeigt die Parametrierung dieses Pulses.

3-PI-ASYM-KONT-DEPH				
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$	$c$ in $\tau_p^{-1}$	$d$ in $\tau_p^{-1}$	$e$ in $\tau_p^{-1}$
-12.89580316	-6.063403136	0.124091385	-4.716826582	21.01627929
3-PI-SYM-KONT-DEPH				
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$	$c$ in $\tau_p^{-1}$	$d$ in $\tau_p^{-1}$	$e$ in $\tau_p^{-1}$
12.97550446	8.177612008	-0.4967012648	2.938617723	n/a
3-PI2-ASYM-KONT-DEPH				
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$	$c$ in $\tau_p^{-1}$	$d$ in $\tau_p^{-1}$	$e$ in $\tau_p^{-1}$
8.7428903	6.071552355	-3.315545196	4.240417707	-3.175956758
3-PI2-SYM-KONT-DEPH				
$a$ in $\tau_p^{-1}$	$b$ in $\tau_p^{-1}$	$c$ in $\tau_p^{-1}$	$d$ in $\tau_p^{-1}$	$e$ in $\tau_p^{-1}$
11.2514318	3.475252516	-1.94496099	-0.3355625273	n/a

Tabelle 3.3.: Tabelle der Parametrierung von kontinuierlichen Lösungen dritter Ordnung bei reiner Dephasierung

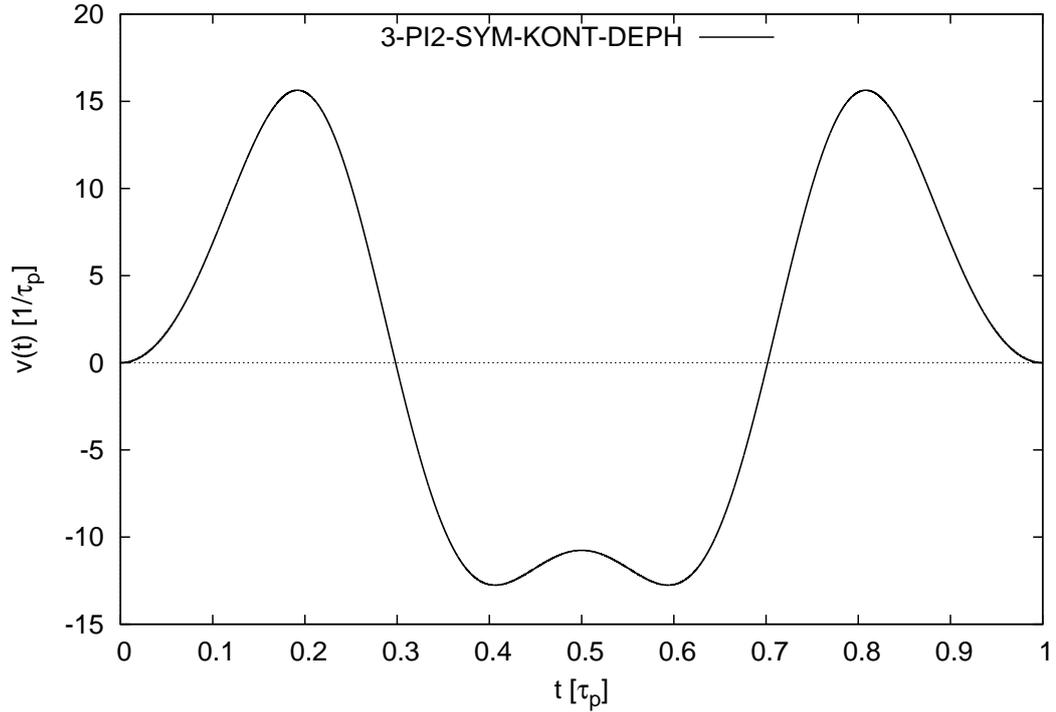


Abbildung 3.12.: Plot des kontinuierlichen, symmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI2-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.30)

### 3.1.2. Komposit-Pulse

Kompositpulse sind Pulse mit stückweise konstanten, alternierenden Amplituden. Zum Parametrieren solcher Pulse wird die Pulsform  $v(t)$  durch eine Folge von Umschaltzeiten  $0 \leq \tau_i \leq \tau_p$  und zwischen diesen Umschaltzeiten vorliegenden Amplituden  $V_i$  beschrieben. Zusätzlich zu den aus der Kurzzeitentwicklung folgenden Einschränkungen wird in jeder Ordnung bei gefordertem  $\psi(\tau_p) = \chi$  stets zusätzlich

$$\psi(\tau_p) = 2 \int_0^{\tau_p} v(t) dt = \chi \quad (3.32)$$

gefordert.

### 3.1.2.1. Pulse in erster Ordnung

Neben Gleichung (3.32) müssen in erster Ordnung die Bedingungen

$$\int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.4) erfüllt werden.

#### $\pi$ -Pulse

Mit dem asymmetrischen Ansatz

$$v(t) = V_0 \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) + (-V_0) \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) + V_0 \Theta(t - \tau_2) \Theta(\tau_p - t) \quad (3.33)$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die drei freien Parameter  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  und  $V_0$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\psi(1) - \chi \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^1 \cos(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.34)$$

mit  $\chi = \pi$  zu erfüllen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “1-PI-ASYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.13 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.4 zu finden. Bei dem so gefundenen Puls handelt es sich wie erwartet um eine Reproduktion des bereits mehrfach gefundenen “CORPSE-PI”-Pulses, siehe [PKRU09].

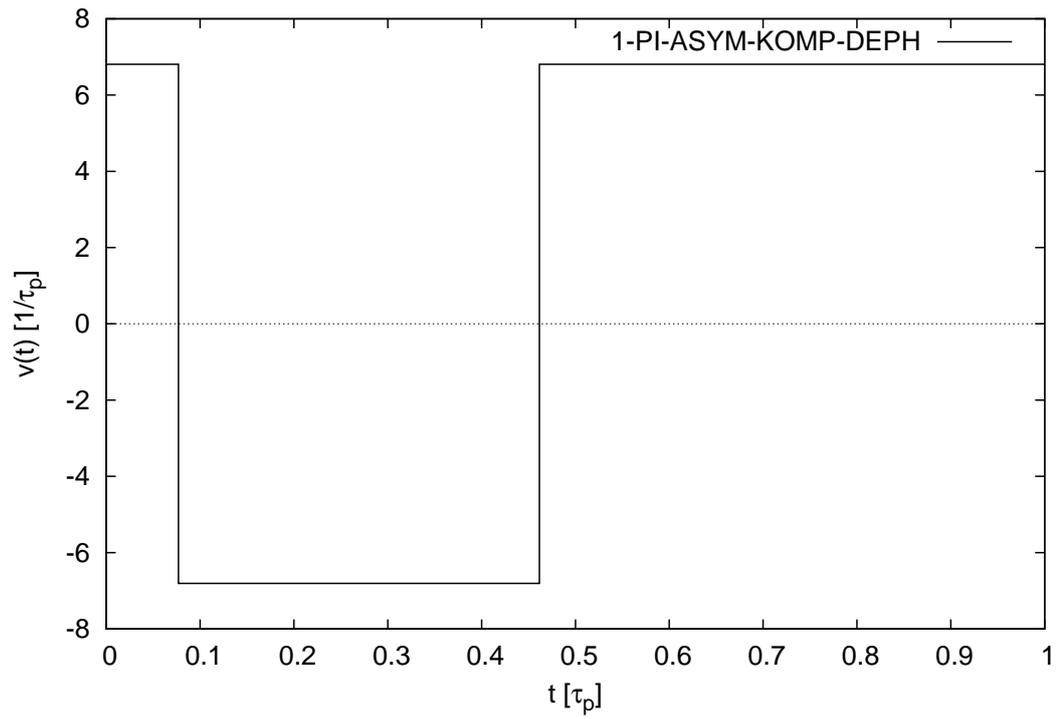


Abbildung 3.13.: Plot des asymmetrischen  $\pi$ -Komposit-Pulses erster Ordnung 1-PI-ASYM-KOMP-DEPH (CORPSE) gemäß Ansatz (3.33)

Mit dem symmetrischen Ansatz

$$v(t) = V_0 \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) + (-V_0) \Theta(t - \tau_1) \Theta((1 - \tau_1) - t) + V_0 \Theta(t - (1 - \tau_1)) \Theta(\tau_p - t) \quad (3.35)$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die zwei freien Parameter  $\tau_1$  und  $V_0$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned} \psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

mit  $\chi = \pi$  zu erfüllen. Wie zuvor bei den symmetrischen, kontinuierlichen Pulsen genügt die Symmetrie des Ansatzes um die Intervallmitte  $\frac{\tau_p}{2}$  mit der selben Argumentation wie zuvor dazu, die aus der ersten Ordnung resultierenden Bedingungen entsprechend zu vereinfachen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “1-PI-SYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.14 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.4 zu finden. Bei dem so gefundenen Puls handelt es sich wie erwartet um eine Reproduktion des bereits mehrfach gefundenen “SCORPSE-PI”-Pulses, siehe [PKRU09].

## $\frac{\pi}{2}$ -Pulse

Mit dem asymmetrischen Ansatz

$$v(t) = V_0 \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) + (-V_0) \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) + V_0 \Theta(t - \tau_2) \Theta(\tau_p - t) \quad (3.37)$$

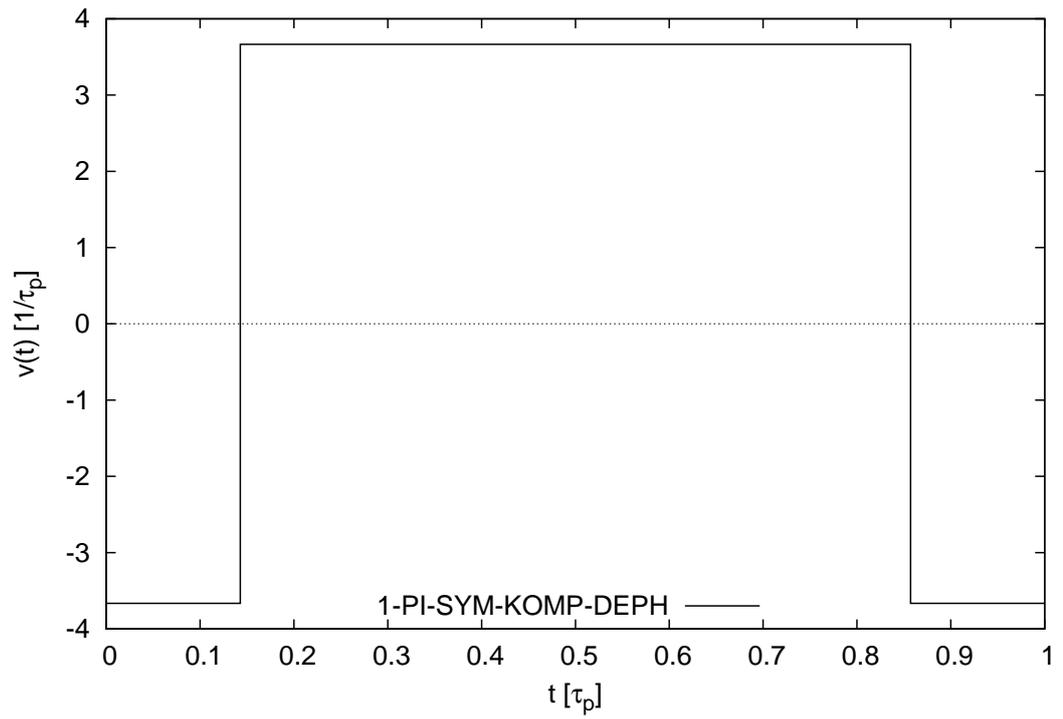


Abbildung 3.14.: Plot des symmetrischen  $\pi$ -Komposit-Pulses erster Ordnung 1-PI-SYM-KOMP-DEPH (SCORPSE) gemäß Ansatz (3.35)

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die drei freien Parameter  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  und  $V_0$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned}\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \cos(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0\end{aligned}\tag{3.38}$$

mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  zu erfüllen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “1-PI2-ASYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.15 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.4 zu finden. Bei dem so gefundenen Puls handelt es sich wie erwartet um eine Reproduktion des bereits mehrfach gefundenen “CORPSE-PI2”-Pulses, siehe [PKRU09].

Mit dem symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}v(t) = &V_0\Theta(t)\Theta(\tau_1 - t) + (-V_0)\Theta(t - \tau_1)\Theta((1 - \tau_1) - t) \\ &+ V_0\Theta(t - (1 - \tau_1))\Theta(\tau_p - t)\end{aligned}\tag{3.39}$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die zwei freien Parameter  $\tau_1$  und  $V_0$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned}\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0\end{aligned}\tag{3.40}$$

mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  zu erfüllen. Wie zuvor bei den symmetrischen, kontinuierlichen Pulsen genügt die Symmetrie des Ansatzes um mit der selben Argumentation wie zuvor die aus der ersten Ordnung resultierenden Bedingungen entsprechend zu vereinfachen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “1-PI2-SYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.16 gezeigt und

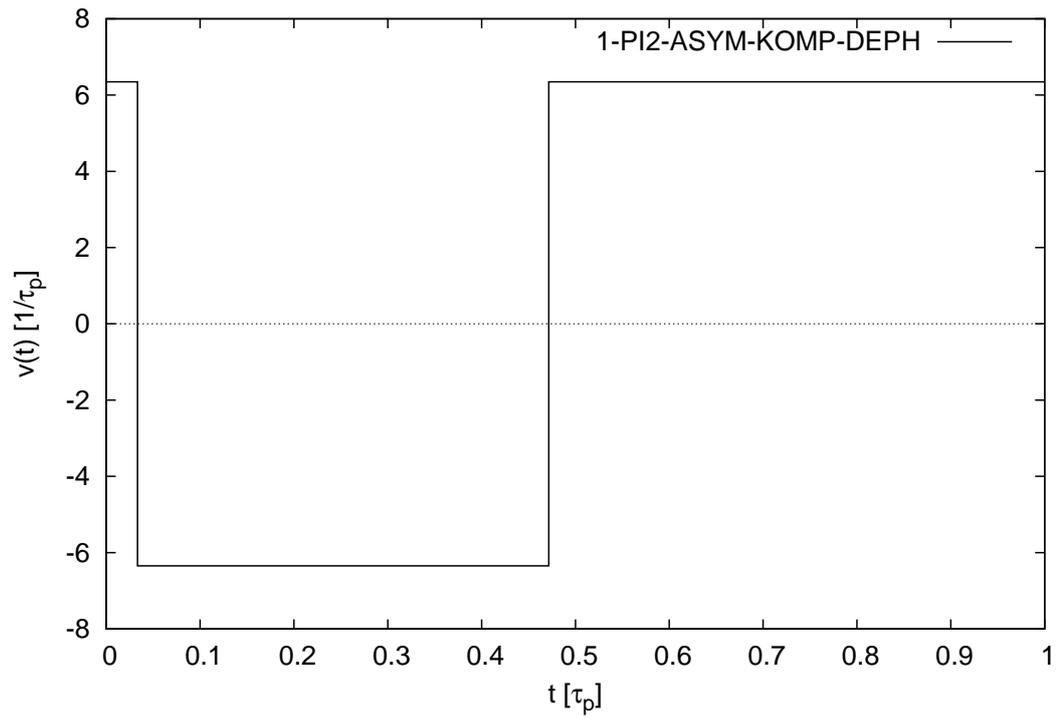


Abbildung 3.15.: Plot des asymmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses erster Ordnung 1-PI2-ASYM-KOMP-DEPH (CORPSE) gemäß Ansatz (3.37)

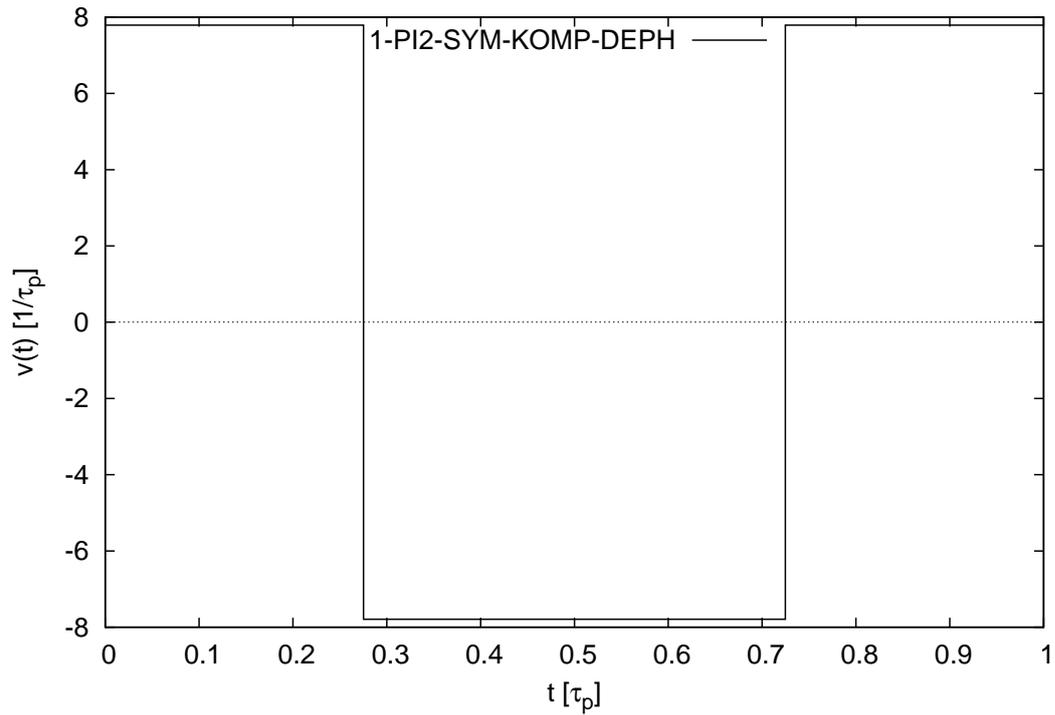


Abbildung 3.16.: Plot des symmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses erster Ordnung 1-PI2-SYM-KOMP-DEPH (SCORPSE) gemäß Ansatz (3.39)

seine Parameter sind in Tabelle 3.4 zu finden. Bei dem so gefundenen Puls handelt es sich wie erwartet um eine Reproduktion des bereits mehrfach gefundenen “SCORPSE-PI2”-Pulses, siehe [PKRU09].

1-PI-ASYM-KOMP-DEPH		
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$
0.07692308 $1/6$	0.46153846 $6/13$	6.80678408 $13\pi/6$
1-PI-SYM-KOMP-DEPH		
$\tau_1$ in $\tau_p$	$1 - \tau_1$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$
0.14285714 $1/7$	0.85714286 $6/7$	-3.66519143 $-7\pi/6$
1-PI2-ASYM-KOMP-DEPH		
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$
0.03341011	0.47152728	6.34584922
1-PI-SYM-KOMP-DEPH		
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$
0.27520107	0.72479893	7.79131772

Tabelle 3.4.: Tabelle der Parametrierung von Komposit-Lösungen erster Ordnung bei reiner Dephasierung

### 3.1.2.2. Pulse in zweiter Ordnung

Neben Gleichung (3.32) und den Bedingungen aus erster Ordnung

$$\int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.4) müssen die Bedingung aus zweiter Ordnung

$$\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.5) erfüllt werden.

#### $\pi$ -Pulse

Mit dem asymmetrischen Ansatz

$$v(t) = V_0 \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) + (-V_1) \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) + V_0 \Theta(t - \tau_2) \Theta(\tau_p - t) \quad (3.41)$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die vier freien Parameter  $\tau_1$ ,  $\tau_2$ ,  $V_0$  und  $V_1$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned}
\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \cos(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0
\end{aligned} \tag{3.42}$$

mit  $\chi = \pi$  zu erfüllen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “2-PI-ASYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.17 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.5 zu finden.

Mit dem symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
v(t) = &V_0\Theta(t)\Theta(\tau_1 - t) \\
&- V_0\Theta(t - \tau_1)\Theta(\tau_2 - t) \\
&+ V_0\Theta(t - \tau_2)\Theta(\tau_p - (1 - \tau_2)) \\
&- V_0\Theta(t - (t - \tau_2))\Theta((1 - \tau_1) - t) \\
&+ V_0\Theta(t - (1 - \tau_1))\Theta(\tau_p - t)
\end{aligned} \tag{3.43}$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die drei freien Parameter  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  und  $V_0$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned}
\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0
\end{aligned} \tag{3.44}$$

mit  $\chi = \pi$  zu erfüllen. Wie zuvor bei den symmetrischen, kontinuierlichen Pulsen

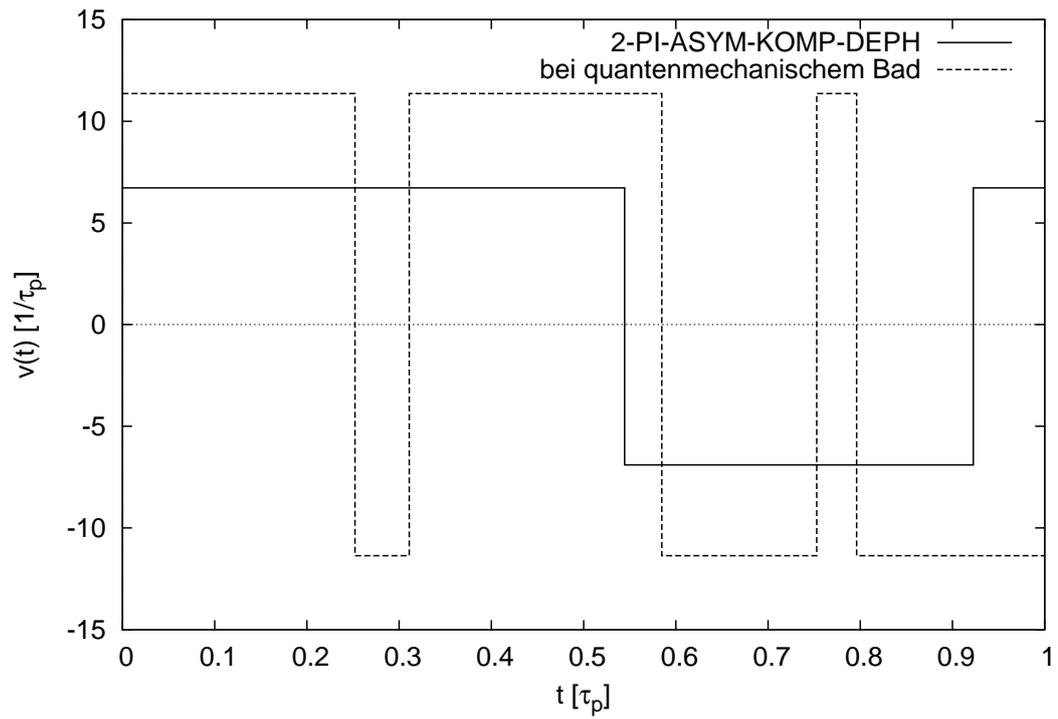


Abbildung 3.17.: Plot des asymmetrischen  $\pi$ -Komposit-Pulses zweiter Ordnung 2-PI-ASYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.41) und seinem gestrichelt dargestellten Analogon bei quantenmechanischem Bad

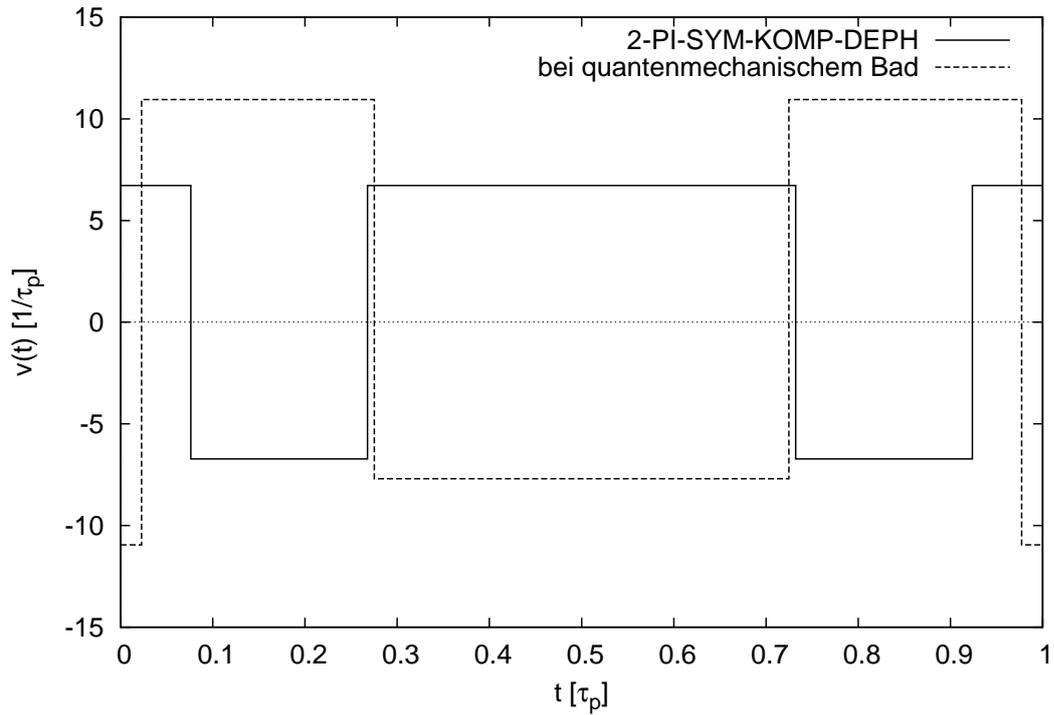


Abbildung 3.18.: Plot des symmetrischen  $\pi$ -Komposit-Pulses zweiter Ordnung 2-PI-SYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.43) und seinem gestrichelt dargestellten Analogon bei quantenmechanischem Bad

genügt die Symmetrie des Ansatzes um die Intervallmitte  $\frac{\tau_p}{2}$  mit der selben Argumentation wie zuvor dazu, die aus der ersten Ordnung resultierenden Bedingungen entsprechend zu vereinfachen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “2-PI-SYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.18 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.5 zu finden.

## $\frac{\pi}{2}$ -Pulse

Mit dem asymmetrischen Ansatz

$$v(t) = V_0 \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) + (-V_1) \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) + V_0 \Theta(t - \tau_2) \Theta(\tau_p - t) \quad (3.45)$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die drei freien Parameter  $\tau_1$ ,  $\tau_2$ ,  $V_0$  und  $V_1$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned} \psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \cos(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (3.46)$$

mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  zu erfüllen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “2-PI2-ASYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.19 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.5 zu finden.

Mit dem symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned} v(t) = & V_0 \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) \\ & - V_0 \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) \\ & + V_0 \Theta(t - \tau_2) \Theta(\tau_p - (1 - \tau_2)) \\ & - V_0 \Theta(t - (t - \tau_2)) \Theta((1 - \tau_1) - t) \\ & + V_0 \Theta(t - (1 - \tau_1)) \Theta(\tau_p - t) \end{aligned} \quad (3.47)$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die drei freien Parameter  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  und  $V_0$ ,

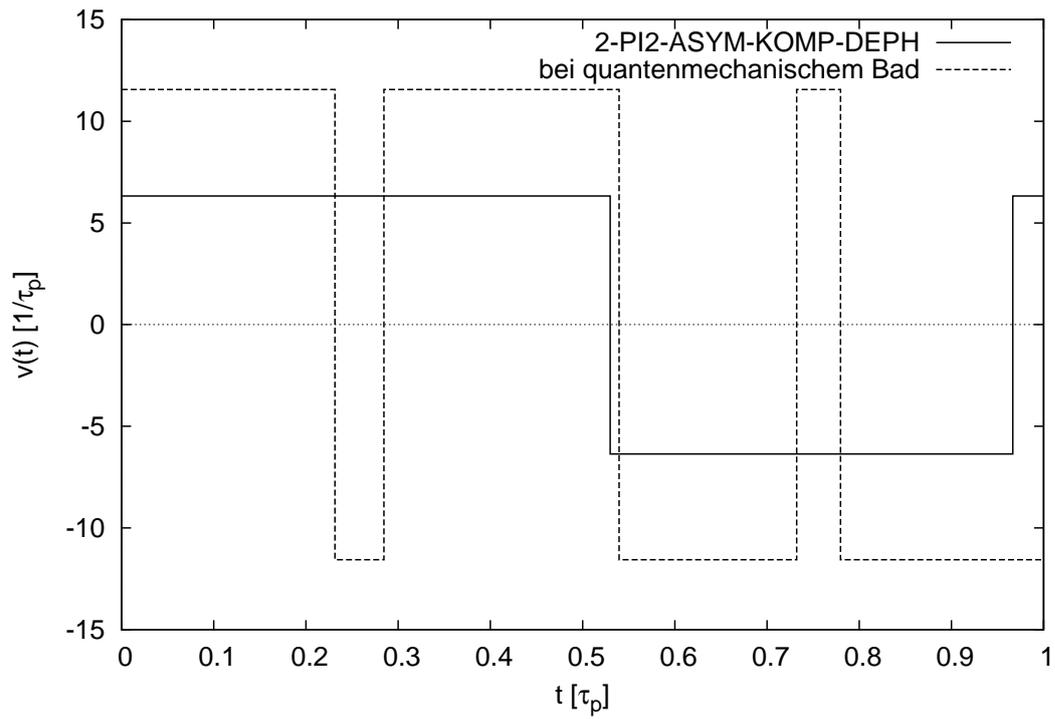


Abbildung 3.19.: Plot des asymmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-ASYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.45) und seinem gestrichelt dargestellten Analogon bei quantenmechanischem Bad

die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned} \psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \tag{3.48}$$

mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  zu erfüllen. Wie zuvor bei den symmetrischen, kontinuierlichen Pulsen genügt die Symmetrie des Ansatzes um die Intervallmitte  $\frac{\tau_p}{2}$  mit der selben Argumentation wie zuvor dazu, die aus der ersten Ordnung resultierenden Bedingungen entsprechend zu vereinfachen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “2-PI2-SYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.20 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.5 zu finden.

2-PI-ASYM-KOMP-DEPH			
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$	$V_1$ in $\tau_p^{-1}$
0.544444403	0.92269941	6.72511339	6.90143991
2-PI-SYM-KOMP-DEPH			
$\tau_1$ in $\tau_p$	$1 - \tau_1$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$	$V_1$ in $\tau_p^{-1}$
0.07623078	0.26784319	6.72572865	n/a
2-PI2-ASYM-KOMP-DEPH			
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$	$V_1$ in $\tau_p^{-1}$
0.5299534	0.9665798	6.32705455	6.36493186
2-PI2-SYM-KOMP-DEPH			
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$	$V_1$ in $\tau_p^{-1}$
0.03312609	0.25209296	6.32709469	n/a

Tabelle 3.5.: Tabelle der Parametrierung von Komposit-Lösungen zweiter Ordnung bei reiner Dephasierung

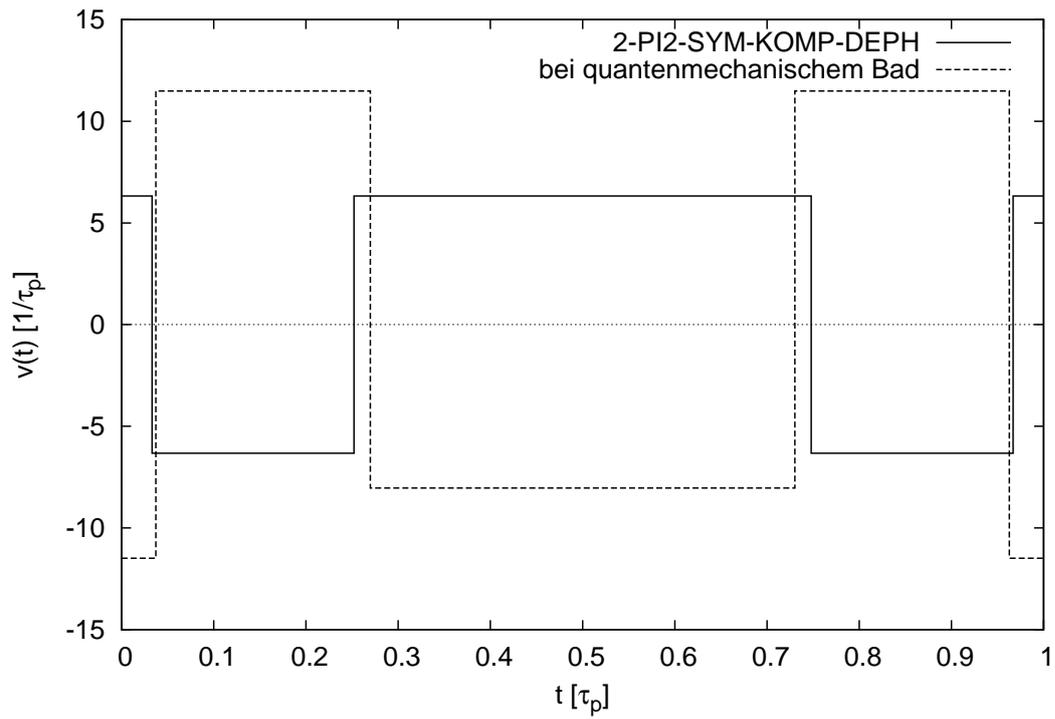


Abbildung 3.20.: Plot des symmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-SYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.47) und seinem gestrichelt dargestellten Analogon bei quantenmechanischem Bad

### 3.1.2.3. Pulse in dritter Ordnung

Neben Gleichung (3.32), den Bedingungen aus erster Ordnung

$$\int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} \sin(\psi(t)) dt \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.4) und der Bedingung aus zweiter Ordnung

$$\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \sin(\psi(t_1) - \psi(t_2)) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.5) müssen von Pulsen dritter Ordnung die Gleichungen

$$\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} (2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3)) dt_3 dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} (2 \cos(\psi_1 + \psi_3 - \psi_2) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3)) dt_3 dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0$$

erfüllt werden.

#### $\pi$ -Pulse

Mit dem asymmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned} v(t) = & V_0 \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) \\ & + (-V_1) \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) \\ & + V_1 \Theta(t - \tau_2) \Theta(\tau_3 - t) \\ & + (-V_1) \Theta(t - \tau_3) \Theta(\tau_4 - t) \\ & + V_0 \Theta(t - \tau_4) \Theta(\tau_p - t) \end{aligned} \quad (3.49)$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die sechs freien Parameter  $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, V_0$  und  $V_1$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned}
\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \cos(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
&\quad - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \cos(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
&\quad - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0
\end{aligned} \tag{3.50}$$

mit  $\chi = \pi$  zu erfüllen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “3-PI-ASYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.21 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.6 zu finden.

Mit dem symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
v(t) &= (-V_0) \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) \\
&\quad + V_1 \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) \\
&\quad + (-V_2) \Theta(t - \tau_2) \Theta((1 - \tau_2) - t) \\
&\quad + V_1 \Theta(t - (1 - \tau_2)) \Theta((1 - \tau_1) - t) \\
&\quad + (-V_0) \Theta(t - (1 - \tau_1)) \Theta(\tau_p - t)
\end{aligned} \tag{3.51}$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die fünf freien Parameter  $\tau_1, \tau_2, V_0, V_1$  und

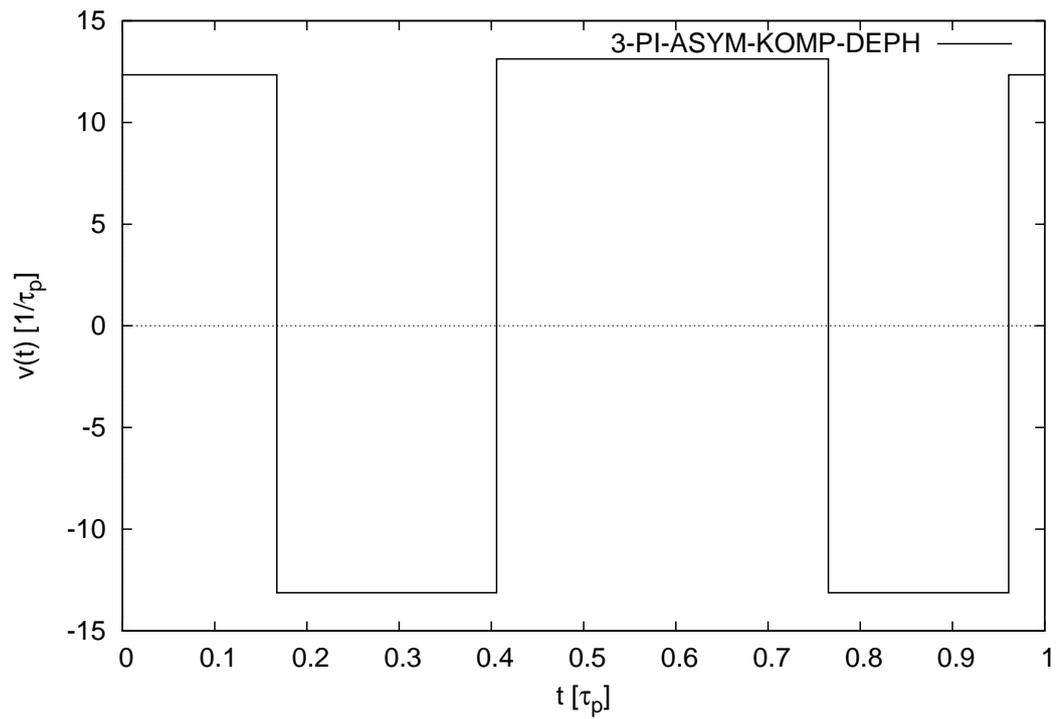


Abbildung 3.21.: Plot des asymmetrischen  $\pi$ -Komposit-Pulses dritter Ordnung 3-PI-ASYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.49)

$V_2$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned}
& \psi(1) - \chi \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
& \quad - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \cos(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
& \quad - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0
\end{aligned} \tag{3.52}$$

mit  $\chi = \pi$  zu erfüllen. Wie zuvor genügt die Symmetrie des Ansatzes um die Intervallmitte  $\frac{\tau_p}{2}$ , um die aus der ersten Ordnung resultierenden Bedingungen entsprechend zu vereinfachen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “3-PI-SYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.21 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.6 zu finden.

## $\frac{\pi}{2}$ -Pulse

Mit dem asymmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
v(t) = & V_0 \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) \\
& + (-V_1) \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) \\
& + V_1 \Theta(t - \tau_2) \Theta(\tau_3 - t) \\
& + (-V_1) \Theta(t - \tau_3) \Theta(\tau_4 - t) \\
& + V_0 \Theta(t - \tau_4) \Theta(\tau_p - t)
\end{aligned} \tag{3.53}$$

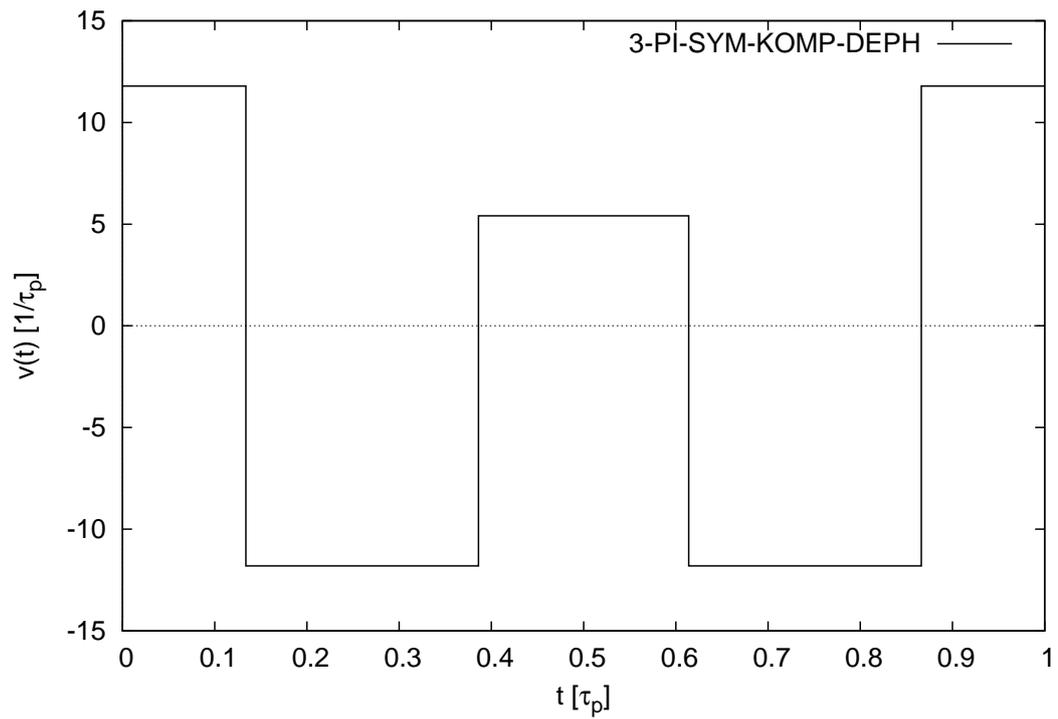


Abbildung 3.22.: Plot des symmetrischen  $\pi$ -Komposit-Pulses dritter Ordnung 3-PI-SYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.51)

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die sechs freien Parameter  $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, V_0$  und  $V_1$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned}
\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \cos(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \sin(\psi(x)) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
&\quad - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \cos(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
&\quad - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0
\end{aligned} \tag{3.54}$$

mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  zu erfüllen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “3-PI2-ASYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.23 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.6 zu finden.

Mit dem symmetrischen Ansatz

$$\begin{aligned}
v(t) &= (-V_0) \Theta(t) \Theta(\tau_1 - t) \\
&\quad + V_1 \Theta(t - \tau_1) \Theta(\tau_2 - t) \\
&\quad + (-V_2) \Theta(t - \tau_2) \Theta((1 - \tau_2) - t) \\
&\quad + V_1 \Theta(t - (1 - \tau_2)) \Theta((1 - \tau_1) - t) \\
&\quad + (-V_0) \Theta(t - (1 - \tau_1)) \Theta(\tau_p - t)
\end{aligned} \tag{3.55}$$

mit  $\Theta$  als Heaviside-Funktion resultieren die fünf freien Parameter  $\tau_1, \tau_2, V_0, V_1$  und

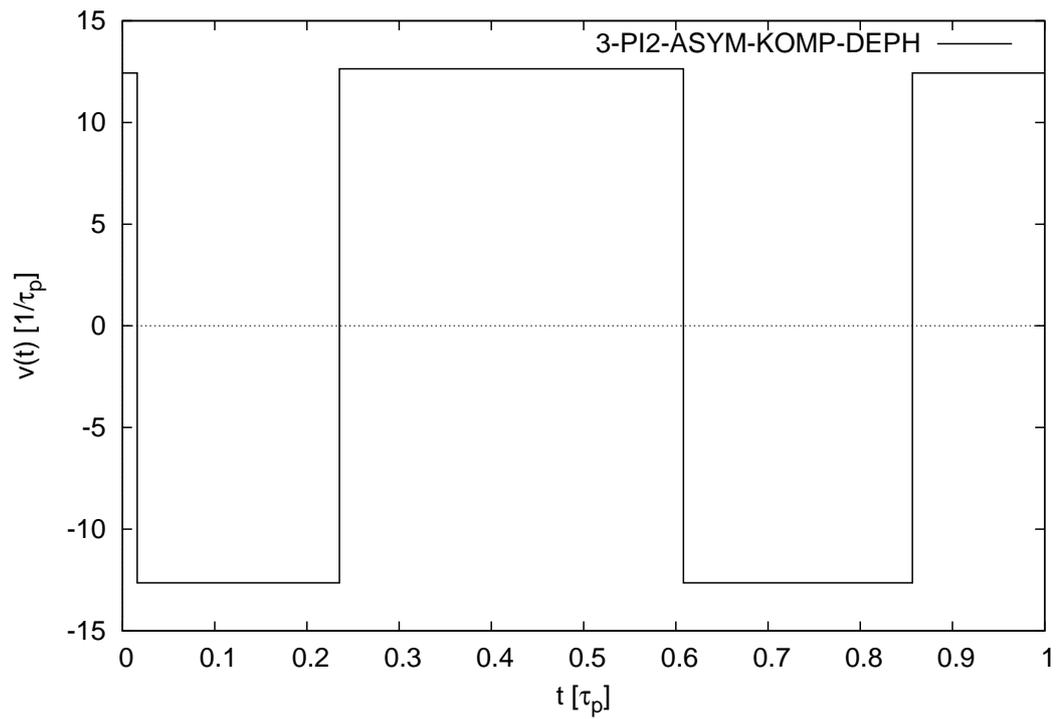


Abbildung 3.23.: Plot des asymmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses dritter Ordnung 3-PI2-ASYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.53)

$V_2$ , die nach der Substitution  $t = x\tau_p$  zur Verfügung stehen um die Gleichungen

$$\begin{aligned}
& \psi(1) - \chi \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \sin(\psi(x)) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \sin(\psi(x_1) - \psi(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \sin(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \sin(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
& \quad - \sin(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2 \cos(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3) - \cos(\psi_2 - \psi_1 + \psi_3) \\
& \quad - \cos(\psi_2 + \psi_1 - \psi_3) dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0
\end{aligned} \tag{3.56}$$

mit  $\chi = \pi$  zu erfüllen. Wie zuvor genügt die Symmetrie des Ansatzes um die Intervallmitte  $\frac{\tau_p}{2}$  aus, um die aus der ersten Ordnung resultierenden Bedingungen entsprechend zu vereinfachen. Mit Rückgriff auf die Algorithmen zur mehrdimensionalen Nullstellensuche aus “SciPy” und unter Berücksichtigung der stückweisen Linearität von  $\psi(x)$ , für Details über den Programmablauf siehe Abschnitt A.5, wird so der Puls “3-PI2-SYM-KOMP-DEPH” gefunden. Dieser ist in Abbildung 3.23 gezeigt und seine Parameter sind in Tabelle 3.6 zu finden.

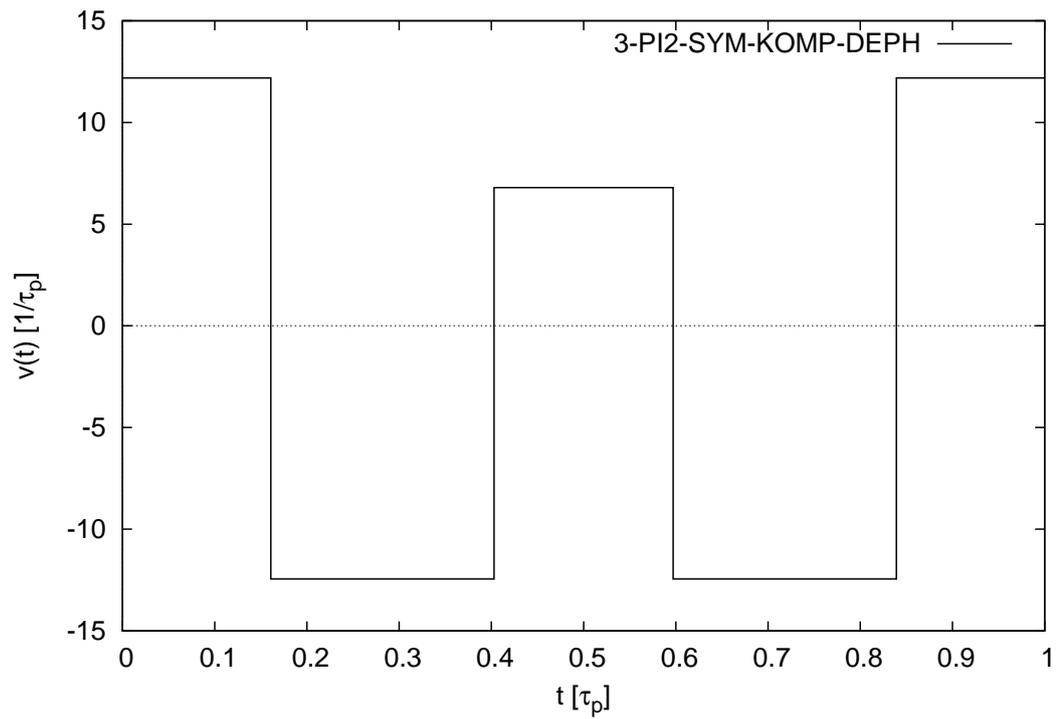


Abbildung 3.24.: Plot des symmetrischen  $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses dritter Ordnung 3-PI2-SYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.55)

3-PI-ASYM-KOMP-DEPH					
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$\tau_3$ in $\tau_p$	$\tau_4$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$	$V_1$ in $\tau_p^{-1}$
0.2624377	0.47843131	0.52156869	0.7375623	11.98448602	12.13724371
3-PI-SYM-KOMP-DEPH					
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$\tau_3$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$	$V_1$ in $\tau_p^{-1}$	$V_2$ in $\tau_p^{-1}$
0.13374803	0.38605179	n/a	11.78911566	11.80444735	5.4071688
3-PI2-ASYM-KOMP-DEPH					
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$\tau_3$ in $\tau_p$	$\tau_4$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$	$V_1$ in $\tau_p^{-1}$
0.01594589	0.23521075	0.60829423	0.85665173	12.42977998	12.6359993
3-PI2-SYM-KOMP-DEPH					
$\tau_1$ in $\tau_p$	$\tau_2$ in $\tau_p$	$\tau_3$ in $\tau_p$	$\tau_4$ in $\tau_p$	$V_0$ in $\tau_p^{-1}$	$V_1$ in $\tau_p^{-1}$
0.16078075	0.40286972	n/a	12.19253805	12.44756024	6.79903802

Tabelle 3.6.: Tabelle der Parametrierung von Komposit-Lösungen dritter Ordnung bei reiner Dephasierung

## 3.2. Frequenzmodulation

Für die Frequenzmodulation sollen zeitlich veränderliche Rotationsachsen, gemäß

$$\vec{a}(t) = \begin{pmatrix} \sin(\theta(t)) \cos(\phi(t)) \\ \sin(\theta(t)) \sin(\phi(t)) \\ \cos(\theta(t)) \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

durch  $\theta(t)$  und  $\phi(t)$  parametrisiert, zugelassen. Mit diesem Ansatz für die Zeitabhängigkeit der Rotationsachse und einem gemäß

$$\vec{v}(t) = \begin{pmatrix} V \cos(\Omega(t)) \\ V \sin(\Omega(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

angesetzten Puls folgt aus dem impliziten Differentialgleichungssystem Gleichung (A.2) als lineares Gleichungssystem für  $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ ,  $\frac{\partial\phi}{\partial t}$  und  $\frac{\partial\theta}{\partial t}$  das explizite System gekoppelter Diffe-

rentialgleichungen

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi}{\partial t} &= 2V \sin(\theta) [\sin(\Omega) \sin(\phi) + \cos(\Omega) \cos(\phi)] \\
\frac{\partial \phi}{\partial t} &= V \frac{\cos\left(\frac{\psi}{2}\right) \sin(\Omega - \psi) - \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos(\theta) \cos(\Omega - \phi)}{\sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \sin(\theta)} \\
\frac{\partial \theta}{\partial t} &= V \frac{\cos\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos(\theta) \cos(\Omega - \phi) + \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \sin(\Omega - \psi)}{\sin\left(\frac{\psi}{2}\right)}
\end{aligned} \tag{3.59}$$

mit zur Übersichtlichkeit ausgelassenen Zeitabhängigkeiten  $\psi(t)$ ,  $\phi(t)$ ,  $\theta(t)$  und  $\Omega(t)$ . Die Anfangsbedingungen ergeben sich mit der Forderung, dass die tatsächliche, momentane Drehachse  $\vec{v}(t)$  zum Zeitpunkt  $t$  mit der effektiven Drehachse  $\vec{a}(t)$  für  $t = 0$  zusammenfällt zu

$$\begin{aligned}
\psi(0) &= 0 \\
\phi(0) &= \Omega(0) \\
\theta(0) &= \frac{\pi}{2}.
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Für den Fall  $\psi(t) = 0$  und für  $t = 0$  ergibt sich für die Ableitungen aus dem Grenzwert  $t \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} \right|_{t=0} &= \frac{1}{2} \left. \frac{\partial \Omega(t)}{\partial t} \right|_{t=0} \\
\left. \frac{\partial \theta(t)}{\partial t} \right|_{t=0} &= 0,
\end{aligned}$$

wobei  $\left. \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|_{t=0}$  trivial durch Ableiten folgt.

Mit der Parametrierung der Drehachse gemäß den Gleichungen (3.57) resultieren dann mit

$$\begin{aligned}
\vec{n}_{\vec{\eta}}(t) &= \eta(t) \begin{pmatrix} -a_y(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x(t) a_z(t) \\ a_x(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_y(t) a_z(t) \\ \cos(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x^2 \end{pmatrix} \\
&\equiv \eta(t) \begin{pmatrix} n_{xz}(t) \\ n_{yz}(t) \\ n_{zz}(t) \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{3.61}$$

wobei  $n_{ij}(t)$  Matricelemente der Drehmatrix (siehe (A.3)) bezeichnen, folgende Einschränkungen für frequenzmodulierte Pulse bei reiner Dephasierung.

**In erster Ordnung in  $\tau_p$**  ergibt sich mit den Gleichungen (3.1) und (3.57) aus dem ersten Term der Magnus-Entwicklung im allgemeinen Fall, siehe Gleichung (2.27),

$$\begin{aligned}\mu^{(1)} &= \int_0^{\tau_p} \vec{n}_{\bar{\eta}}(t) \vec{\sigma} dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \eta(t) \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_{xz}(t) \\ n_{yz}(t) \\ n_{zz}(t) \end{pmatrix} dt \\ &= \int_0^{\tau_p} \eta(t) (\sigma_x n_{xz}(t) + \sigma_y n_{yz}(t) + \sigma_z n_{zz}(t)) dt.\end{aligned}$$

Mit dem Erwartungswert nach Gleichung (2.10) für den stochastischen Prozess gilt schließlich

$$\begin{aligned}\mu^{(1)} &= \bar{\eta} \sigma_x \int_0^{\tau_p} -a_y(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x(t) a_z(t) dt \\ &\quad + \bar{\eta} \sigma_y \int_0^{\tau_p} a_x(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_y(t) a_z(t) dt \quad (3.62) \\ &\quad + \bar{\eta} \sigma_z \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x^2 dt\end{aligned}$$

in erster Ordnung.

**In zweiter Ordnung in  $\tau_p$**  ergibt sich mit den Gleichungen (3.1) und (3.57) aus dem zweiten Term der Magnus-Entwicklung im allgemeinen Fall, siehe Gleichung (2.28),

$$\begin{aligned}\mu^{(2)} &= 2i \vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} (\vec{n}_{\bar{\eta}}(t_1) \times \vec{n}_{\bar{\eta}}(t_2)) dt_2 dt_1 \\ &= 2i \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \eta(t_1) \eta(t_2) \begin{pmatrix} n_{xz}(t_1) \\ n_{yz}(t_1) \\ n_{zz}(t_1) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} n_{xz}(t_2) \\ n_{yz}(t_2) \\ n_{zz}(t_2) \end{pmatrix} dt_2 dt_1.\end{aligned}$$

Mit der Autokorrelationsfunktion gemäß Gleichung (2.13) ergibt sich schließlich in

zweiter Ordnung

$$\begin{aligned}
\mu^{(2)} = & 2i\sigma_x \left( \bar{\eta}^2 + \sigma^2 \right) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{yz}(t_1) n_{zz}(t_2) - n_{zz}(t_1) n_{yz}(t_2) dt_2 dt_1 \\
& + 2i\sigma_y \left( \bar{\eta}^2 + \sigma^2 \right) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{zz}(t_1) n_{xz}(t_2) - n_{xz}(t_1) n_{zz}(t_2) dt_2 dt_1 \\
& + 2i\sigma_z \left( \bar{\eta}^2 + \sigma^2 \right) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{xz}(t_1) n_{yz}(t_2) - n_{yz}(t_1) n_{xz}(t_2) dt_2 dt_1,
\end{aligned} \tag{3.63}$$

mit den Matrixelementen  $n_{ij}(t)$  der Drehmatrix (A.3).

**In dritter Ordnung in  $\tau_p$**  ergibt sich mit den Gleichungen (3.1) und (3.2) so aus dem dritten Term der Magnus-Entwicklung im allgemeinen Fall, siehe Gleichung (2.29),

$$\begin{aligned}
\mu^{(3)} = & -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
& 2\vec{n}_{\bar{\eta}}(t_2) (\vec{n}_{\bar{\eta}}(t_1) \vec{n}_{\bar{\eta}}(t_3)) \\
& - \vec{n}_{\bar{\eta}}(t_3) (\vec{n}_{\bar{\eta}}(t_1) \vec{n}_{\bar{\eta}}(t_2)) \\
& - \vec{n}_{\bar{\eta}}(t_1) (\vec{n}_{\bar{\eta}}(t_3) \vec{n}_{\bar{\eta}}(t_2)) \\
& dt_3 dt_2 dt_1 \\
= & -4 \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2 \begin{pmatrix} n_{xz}(t_2) \\ n_{yz}(t_2) \\ n_{zz}(t_2) \end{pmatrix} A_{13} \eta(t_3) \eta(t_2) \eta(t_1) dt_3 dt_2 dt_1 \\
& -4 \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} - \begin{pmatrix} n_{xz}(t_3) \\ n_{yz}(t_3) \\ n_{zz}(t_3) \end{pmatrix} A_{12} \eta(t_3) \eta(t_2) \eta(t_1) dt_3 dt_2 dt_1 \\
& -4 \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} - \begin{pmatrix} n_{xz}(t_1) \\ n_{yz}(t_1) \\ n_{zz}(t_1) \end{pmatrix} A_{32} \eta(t_3) \eta(t_2) \eta(t_1) dt_3 dt_2 dt_1
\end{aligned}$$

mit  $A_{ij} = n_{xz}(t_i) n_{xz}(t_j) + n_{yz}(t_i) n_{yz}(t_j) + n_{zz}(t_i) n_{zz}(t_j)$ . Daraus ergibt sich auf

der rechten Seite

$$\begin{aligned}
& -4\sigma_x \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{xz}(t_2) A_{13} - n_{xz}(t_3) A_{12} - n_{xz}(t_1) A_{32} \\
& \quad \eta(t_3) \eta(t_2) \eta(t_1) dt_3 dt_2 dt_1 \\
& -4\sigma_y \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{yz}(t_2) A_{13} - n_{yz}(t_3) A_{12} - n_{yz}(t_1) A_{32} \\
& \quad \eta(t_3) \eta(t_2) \eta(t_1) dt_3 dt_2 dt_1 \\
& -4\sigma_z \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{zz}(t_2) A_{13} - n_{zz}(t_3) A_{12} - n_{zz}(t_1) A_{32} \\
& \quad \eta(t_3) \eta(t_2) \eta(t_1) dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Zusammen mit dem aus dem Isserli- bzw. Wick-Theorem als Gleichung (2.11) gefundenen Ausdruck und der Taylorentwicklung für die auftretenden Autokorrelationsfunktionen gemäß (2.13) ergibt sich in dritter Ordnung in  $\tau_p$  schließlich

$$\begin{aligned}
\mu^{(3)} = & -4\sigma_x \left( \bar{\eta}^3 + 3\sigma\bar{\eta} \right) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{xz}(t_2) A_{13} \\
& - n_{xz}(t_3) A_{12} - n_{xz}(t_1) A_{32} dt_3 dt_2 dt_1 \\
& -4\sigma_y \left( \bar{\eta}^3 + 3\sigma\bar{\eta} \right) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{yz}(t_2) A_{13} \\
& - n_{yz}(t_3) A_{12} - n_{yz}(t_1) A_{32} dt_3 dt_2 dt_1 \\
& -4\sigma_z \left( \bar{\eta}^3 + 3\sigma\bar{\eta} \right) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{zz}(t_2) A_{13} \\
& - n_{zz}(t_3) A_{12} - n_{zz}(t_1) A_{32} dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned} \tag{3.64}$$

### 3.2.1. Frequenzmodulierte Lösungen

Für frequenzmodulierte Pulse müssen Ansätze für den zeitlichen Verlauf der Frequenz  $\Omega(t)$  des Kontrollpulses gemäß Gleichung (3.58) gemacht werden. Dazu werden erneut Fourierreihen

$$\Omega(t) = \sum_n b_{2n-1} \sin\left(2\pi n \frac{t}{\tau_p}\right) + b_{2n} \left( \cos\left(2\pi n \frac{t}{\tau_p}\right) - 1 \right)$$

angesetzt. So können die Koeffizienten und die Amplitude  $V$  als freie Parameter angepasst werden. Neben den aus der Zeitentwicklung resultierenden Bedingungen müssen alle diese Ansätze zusätzlich die Bedingungen

$$\theta(t) = \frac{\pi}{2} \quad (3.65)$$

und

$$\psi(\tau_p) = \chi \quad (3.66)$$

bei gewünschter Rotation um  $\chi$  erfüllen.

### 3.2.1.1. Pulse erster Ordnung

Pulse erster Ordnung müssen neben den Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau_p} -a_y(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x(t) a_z(t) dt &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} a_x(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_y(t) a_z(t) dt &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x^2 dt &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

gemäß Gleichung (3.62) zusätzlich die Gleichungen (3.65) und (3.66) erfüllen.

#### $\pi$ -Puls

Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned} \Omega(t) = &b_1 \sin(2\pi x) + b_2 (\cos(2\pi x) - 1) \\ &+ b_3 \sin(4\pi x) + b_4 (\cos(4\pi x) - 1) \end{aligned} \quad (3.67)$$

müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  somit die einheitenlosen Gleichungen

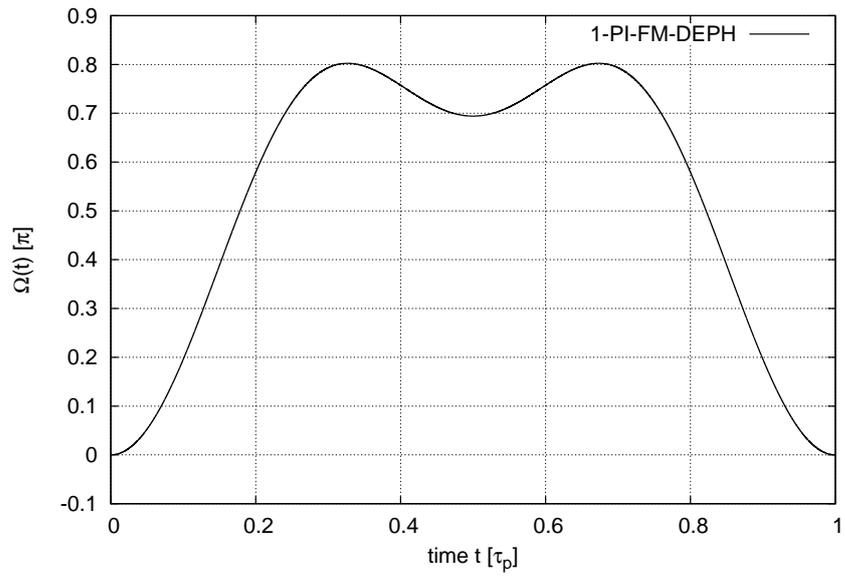
$$\begin{aligned}
\int_0^1 -a_y(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 a_x(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_y(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \cos(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x^2 dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
\theta(1) - \frac{\pi}{2} &\stackrel{!}{=} 0,
\end{aligned} \tag{3.68}$$

wobei  $\psi(1)$  und  $\theta(1)$  aus der Integration des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.59) folgt, mit  $\chi = \pi$  erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur numerischen Integration von Differentialgleichungssystemen, zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der “GNU Scientific Library” (GSL), für Details zum Programmablauf siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls “1-PI-FM-DEPH” gefunden. Er ist in Abbildung 3.25(a) geplottet, der zeitliche Verlauf der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während des Pulses ist in Abbildung 3.25(b) gezeigt und Tabelle 3.7 zeigt die angepassten Parameter.

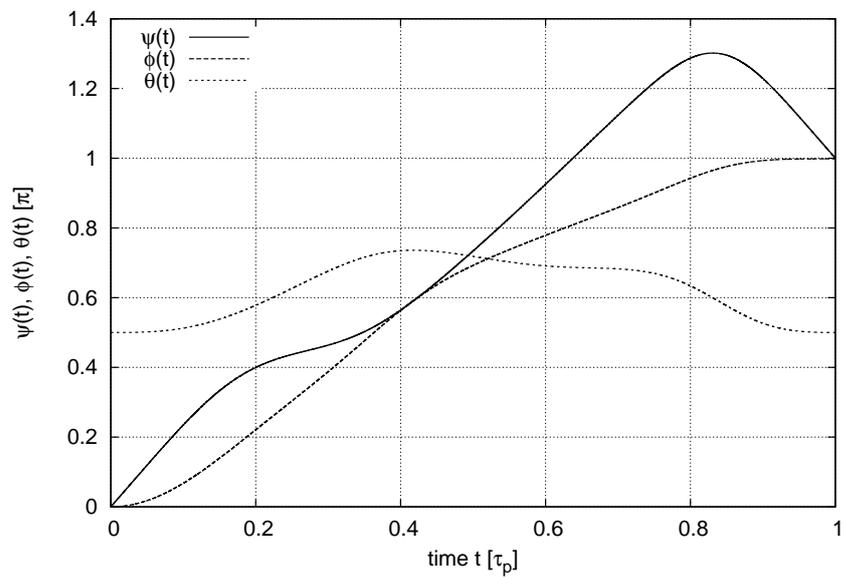
## $\frac{\pi}{2}$ -Puls

Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned}
\Omega(t) = &b_1 \sin(2\pi x) + b_2 (\cos(2\pi x) - 1) \\
&+ b_3 \sin(4\pi x) + b_4 (\cos(4\pi x) - 1)
\end{aligned} \tag{3.69}$$



(a) Plot des frequenzmodulierten  $\pi$ -Pulses erster Ordnung 1-PI-FM-DEPH gemäß Ansatz (3.67)



(b) Plot des zeitlichen Verlaufs der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während 1-PI-FM-DEPH

Abbildung 3.25.: 1-PI-FM-DEPH

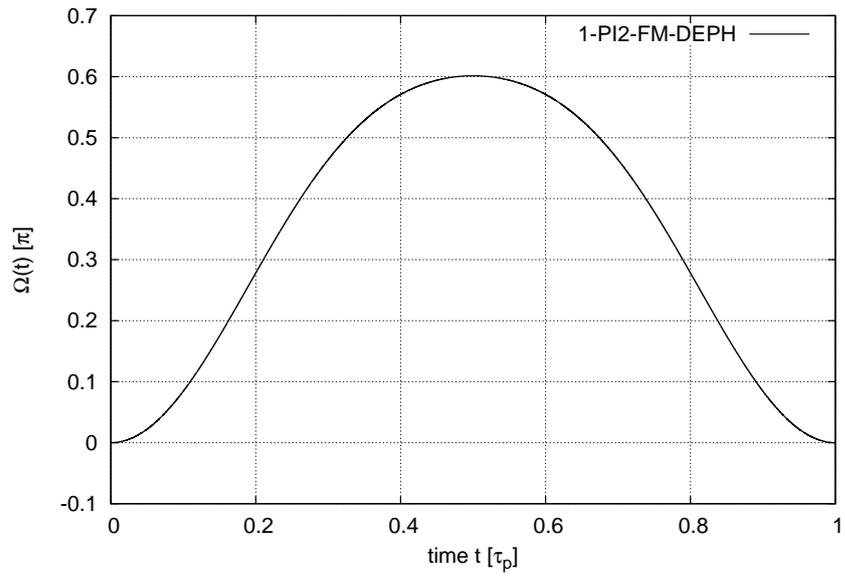
müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  somit die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 -a_y(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 a_x(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_y(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 \cos(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x^2 dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \theta(1) - \frac{\pi}{2} &\stackrel{!}{=} 0,
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

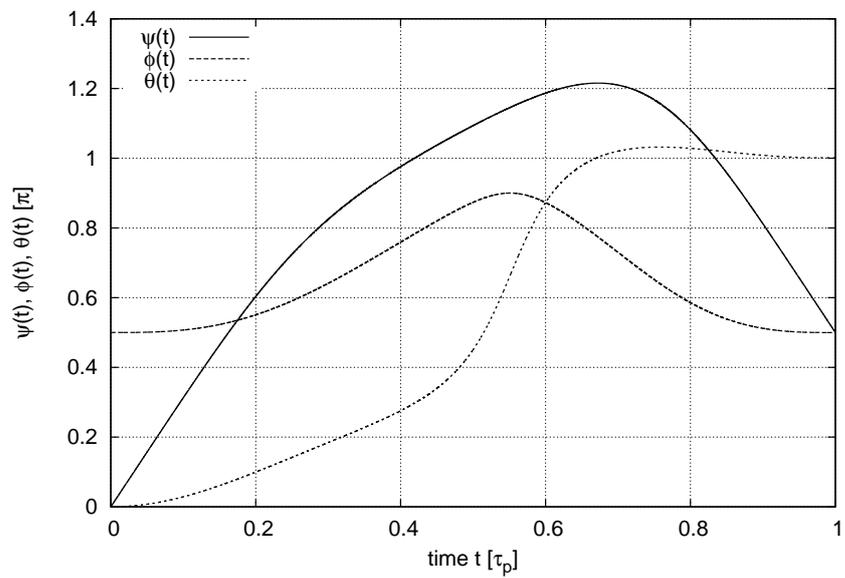
wobei  $\psi(1)$  und  $\theta(1)$  aus der Integration des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.59) folgt, mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur numerischen Integration von Differentialgleichungssystemen, zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der ‘‘GNU Scientific Library’’ (GSL), für Details zum Programmablauf siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls ‘‘1-PI2-FM-DEPH’’ gefunden. Er ist in Abbildung 3.26(a) geplottet, der zeitliche Verlauf der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während des Pulses ist in Abbildung 3.26(b) gezeigt und Tabelle 3.7 zeigt die angepassten Parameter.

1-PI-FM-DEPH	
Parameter	Wert
$V$	$3.751157411 \tau_p^{-1}$
$b_1$	$2.145615987 \cdot 10^{-13}$
$b_2$	$-1.090479108$
$b_3$	$1.924749755 \cdot 10^{-13}$
$b_4$	$-0.5889134264$
1-PI-FM-DEPH	
Parameter	Wert
$V$	$4.928276883 \tau_p^{-1}$
$b_1$	$8.23430104 \cdot 10^{-14}$
$b_2$	$-0.9448515812$
$b_3$	$1.094139729 \cdot 10^{-13}$
$b_4$	$-0.1220876571$

Tabelle 3.7.: Tabelle der Parametrierung von frequenzmodulierten Lösungen erster Ordnung bei reiner Dephasierung



(a) Plot des frequenzmodulierten  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses erster Ordnung 1-PI2-FM-DEPH gemäß Ansatz (3.69)



(b) Plot des zeitlichen Verlaufs der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während 1-PI2-FM-DEPH

Abbildung 3.26.: 1-PI2-FM-DEPH

### 3.2.1.2. Pulse zweiter Ordnung

Pulse zweiter Ordnung müssen neben den Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau_p} -a_y(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x(t) a_z(t) dt &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} a_x(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_y(t) a_z(t) dt &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x^2 dt &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

gemäß Gleichung (3.62) und den Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{yz}(t_1) n_{zz}(t_2) - n_{zz}(t_1) n_{yz}(t_2) dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{zz}(t_1) n_{xz}(t_2) - n_{xz}(t_1) n_{zz}(t_2) dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{xz}(t_1) n_{yz}(t_2) - n_{xz}(t_1) n_{xz}(t_2) dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0, \end{aligned}$$

mit den Drehmatrixelementen  $n_{ij}(t)$ , gemäß Gleichung (3.63) zusätzlich die Gleichungen (3.65) und (3.66) erfüllen.

#### $\pi$ -Puls

Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned} \Omega(t) = & b_1 \sin(2\pi x) + b_2 (\cos(2\pi x) - 1) \\ & + b_3 \sin(4\pi x) + b_4 (\cos(4\pi x) - 1) \\ & + b_5 \sin(6\pi x) + b_6 (\cos(6\pi x) - 1) \\ & + b_7 \sin(8\pi x) \end{aligned} \tag{3.71}$$

müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  somit die einheitenlosen Gleichungen

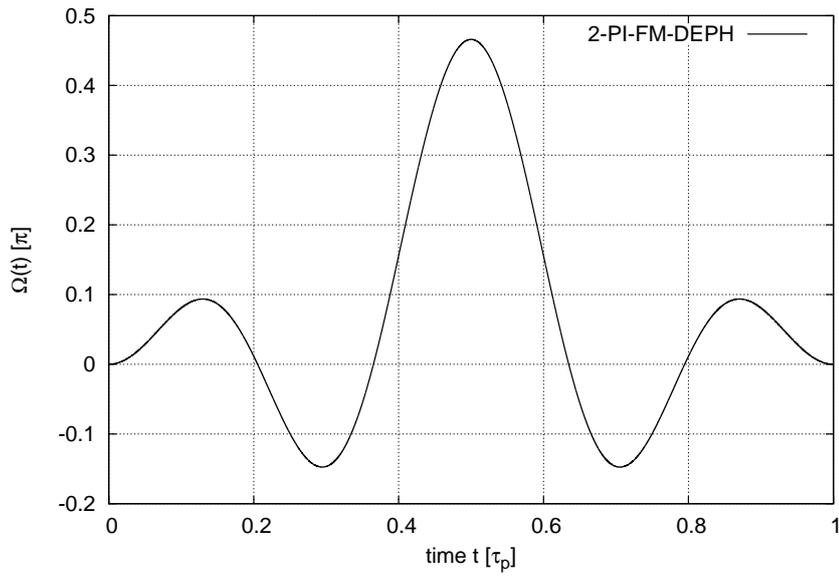
$$\begin{aligned}
\int_0^1 -a_y(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 a_x(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_y(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \cos(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x^2 dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} n_{yz}(x_1) n_{zz}(x_2) - n_{zz}(x_1) n_{yz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} n_{zz}(x_1) n_{xz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{zz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} n_{xz}(x_1) n_{yz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{xz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
\theta(1) - \frac{\pi}{2} &\stackrel{!}{=} 0,
\end{aligned} \tag{3.72}$$

wobei  $\psi(1)$  und  $\theta(1)$  aus der Integration des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.59) folgt, mit  $\chi = \pi$  erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur numerischen Integration von Differentialgleichungssystemen, zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der “GNU Scientific Library” (GSL), für Details zum Programmablauf siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls “2-PI-FM-DEPH” gefunden. Er ist in Abbildung 3.27(a) geplottet, der zeitliche Verlauf der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während des Pulses ist in Abbildung 3.27(b) gezeigt und Tabelle 3.8 zeigt die angepassten Parameter.

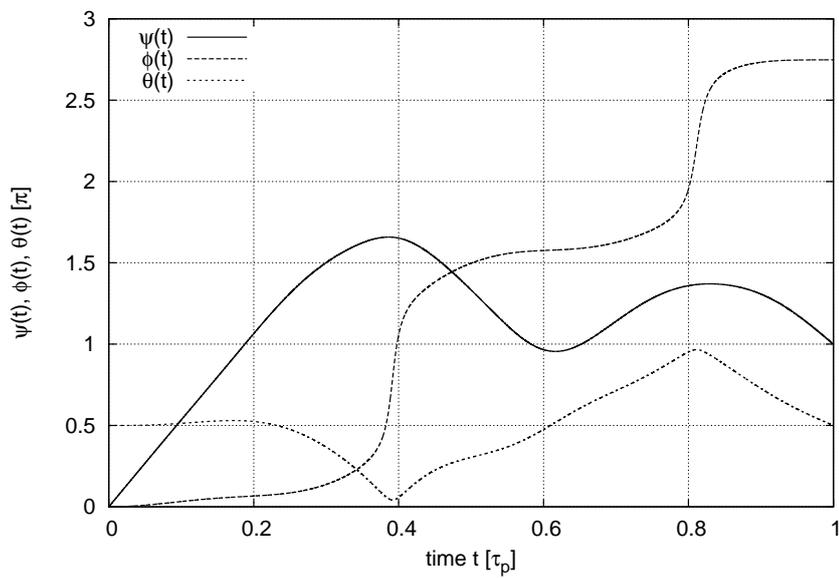
### $\frac{\pi}{2}$ -Puls

Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned}
\Omega(t) = &b_1 \sin(2\pi x) + b_2 (\cos(2\pi x) - 1) \\
&+ b_3 \sin(4\pi x) + b_4 (\cos(4\pi x) - 1) \\
&+ b_5 \sin(6\pi x) + b_6 (\cos(6\pi x) - 1) \\
&+ b_7 \sin(8\pi x)
\end{aligned} \tag{3.73}$$



(a) Plot des frequenzmodulierten  $\pi$ -Pulses erster Ordnung 2-PI-FM-DEPH gemäß Ansatz (3.71)



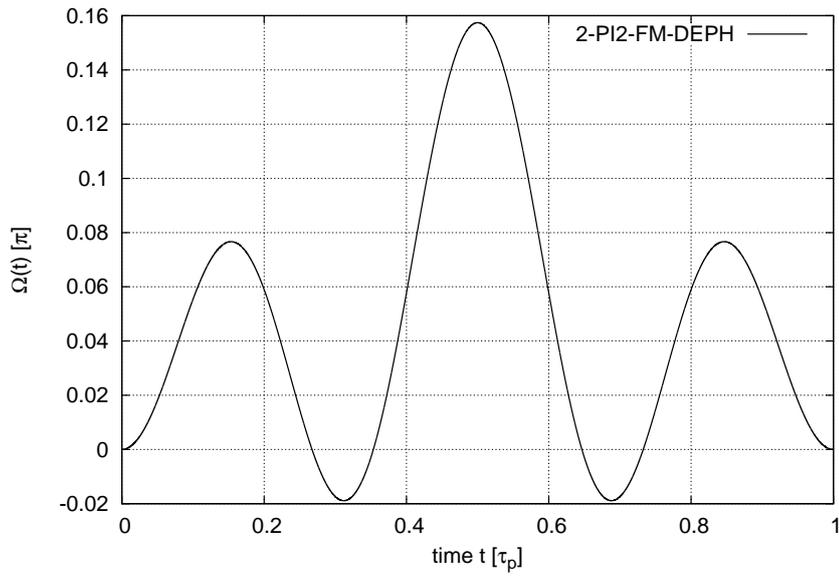
(b) Plot des zeitlichen Verlaufs der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während 2-PI-FM-DEPH

Abbildung 3.27.: 2-PI-FM-DEPH

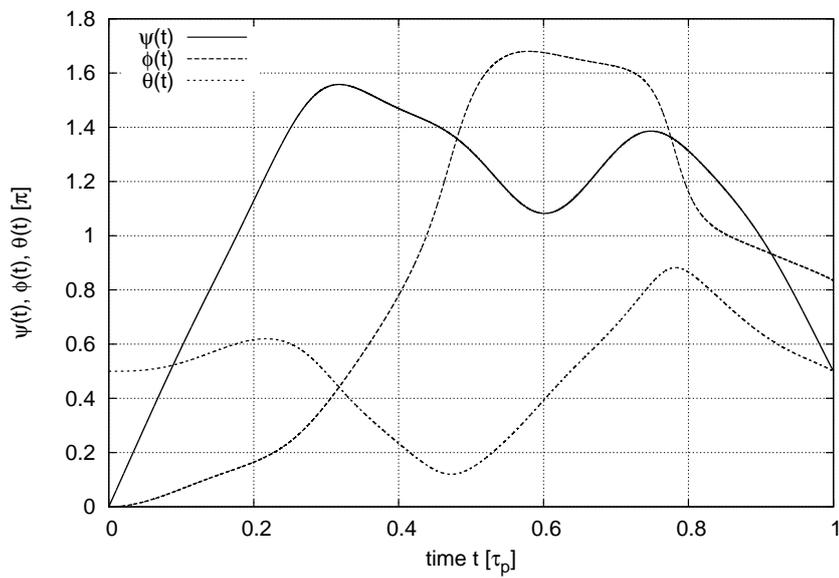
müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  somit die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
\int_0^1 -a_y(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 a_x(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_y(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \cos(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x^2 dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} n_{yz}(x_1) n_{zz}(x_2) - n_{zz}(x_1) n_{yz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} n_{zz}(x_1) n_{xz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{zz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
\int_0^1 \int_0^{x_1} n_{xz}(x_1) n_{yz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{xz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
\psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
\theta(1) - \frac{\pi}{2} &\stackrel{!}{=} 0,
\end{aligned} \tag{3.74}$$

wobei  $\psi(1)$  und  $\theta(1)$  aus der Integration des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.59) folgt, mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur numerischen Integration von Differentialgleichungssystemen, zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der “GNU Scientific Library” (GSL), für Details zum Programmablauf siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls “2-PI2-FM-DEPH” gefunden. Er ist in Abbildung 3.28(a) geplottet, der zeitliche Verlauf der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während des Pulses ist in Abbildung 3.28(b) gezeigt und Tabelle 3.8 zeigt die angepassten Parameter.



(a) Plot des frequenzmodulierten  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses erster Ordnung 2-PI2-FM-DEPH gemäß Ansatz (3.73)



(b) Plot des zeitlichen Verlaufs der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während 2-PI2-FM-DEPH

Abbildung 3.28.: 2-PI2-FM-DEPH

2-PI-FM-DEPH	
Parameter	Wert
$V$	$8.420030525 \tau_p^{-1}$
$b_1$	$-1.6230316 \cdot 10^{-15}$
$b_2$	$-0.3074903818$
$b_3$	$-1.497217739 \cdot 10^{-15}$
$b_4$	$0.52195722$
$b_5$	$-6.299741329 \cdot 10^{-15}$
$b_6$	$-0.4245393438$
$b_7$	$-8.143869422 \cdot 10^{-15}$
2-PI2-FM-DEPH	
Parameter	Wert
$V$	$9.352608401 \tau_p^{-1}$
$b_1$	$2.550126544 \cdot 10^{-13}$
$b_2$	$-0.2251249703$
$b_3$	$-7.314102307 \cdot 10^{-14}$
$b_4$	$0.3160590947$
$b_5$	$1.01330672 \cdot 10^{-14}$
$b_6$	$-0.5517229043$
$b_7$	$2.519696222 \cdot 10^{-14}$

Tabelle 3.8.: Tabelle der Parametrierung von frequenzmodulierten Lösungen zweiter Ordnung bei reiner Dephasierung

### 3.2.1.3. Pulse dritter Ordnung

Pulse dritter Ordnung müssen neben den Gleichungen

$$\int_0^{\tau_p} -a_y(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x(t) a_z(t) dt \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} a_x(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_y(t) a_z(t) dt \stackrel{!}{=} 0$$

$$\int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x^2 dt \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß Gleichung (3.62), den Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{yz}(t_1) n_{zz}(t_2) - n_{zz}(t_1) n_{yz}(t_2) dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{zz}(t_1) n_{xz}(t_2) - n_{xz}(t_1) n_{zz}(t_2) dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{xz}(t_1) n_{yz}(t_2) - n_{yz}(t_1) n_{xz}(t_2) dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0, \end{aligned}$$

mit den Drehmatrixelementen  $n_{ij}(t)$ , gemäß Gleichung (3.63) und den Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{xz}(t_2) A_{13} - n_{xz}(t_3) A_{12} - n_{xz}(t_1) A_{32} dt_3 dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{yz}(t_2) A_{13} - n_{yz}(t_3) A_{12} - n_{yz}(t_1) A_{32} dt_3 dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} 2n_{zz}(t_2) A_{13} - n_{zz}(t_3) A_{12} - n_{zz}(t_1) A_{32} dt_3 dt_2 dt_1 &\stackrel{!}{=} 0, \end{aligned}$$

mit  $A_{ij} = n_{xz}(t_i) n_{xz}(t_j) + n_{yz}(t_i) n_{yz}(t_j) + n_{zz}(t_i) n_{zz}(t_j)$ , gemäß Gleichung (3.64) zusätzlich die Gleichungen (3.65) und (3.66) erfüllen.

## $\pi$ -Puls

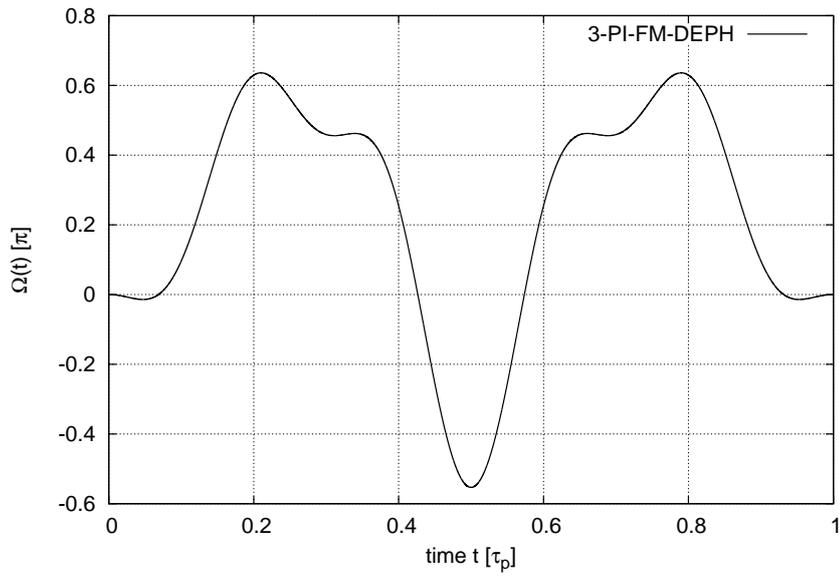
Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned} \Omega(t) = & b_1 \sin(2\pi x) + b_2 (\cos(2\pi x) - 1) \\ & + b_3 \sin(4\pi x) + b_4 (\cos(4\pi x) - 1) \\ & + b_5 \sin(6\pi x) + b_6 (\cos(6\pi x) - 1) \\ & + b_7 \sin(8\pi x) + b_8 (\cos(8\pi x) - 1) \\ & + b_9 \sin(10\pi x) + b_{10} (\cos(10\pi x) - 1) \end{aligned} \tag{3.75}$$

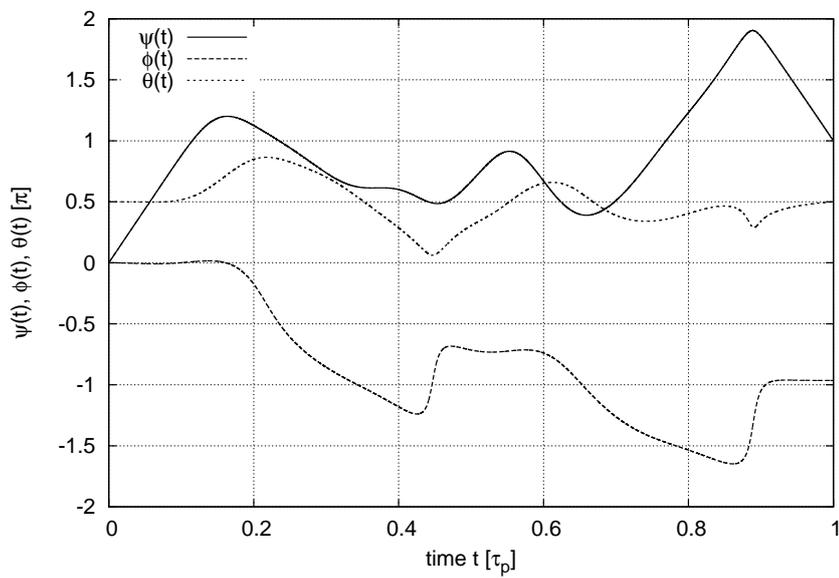
müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  somit die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 -a_y(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x(x) a_z(x) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 a_x(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_y(x) a_z(x) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \cos(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x^2 dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{yz}(x_1) n_{zz}(x_2) - n_{zz}(x_1) n_{yz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{zz}(x_1) n_{xz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{zz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{xz}(x_1) n_{yz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{xz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2n_{xz}(x_2) A_{13} - n_{xz}(x_3) A_{12} - n_{xz}(x_1) A_{32} dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2n_{yz}(x_2) A_{13} - n_{yz}(x_3) A_{12} - n_{yz}(x_1) A_{32} dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2n_{zz}(x_2) A_{13} - n_{zz}(x_3) A_{12} - n_{zz}(x_1) A_{32} dx_3 dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \psi(1) - \chi \stackrel{!}{=} 0 \\
& \theta(1) - \frac{\pi}{2} \stackrel{!}{=} 0,
\end{aligned} \tag{3.76}$$

wobei  $\psi(1)$  und  $\theta(1)$  aus der Integration des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.59) folgt, mit  $\chi = \pi$  erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur numerischen Integration von Differentialgleichungssystemen, zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der ‘‘GNU Scientific Library’’ (GSL), für Details zum Programmablauf siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls ‘‘3-PI-FM-DEPH’’ gefunden. Er ist in Abbildung 3.29(a) geplottet, der zeitliche Verlauf der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während des Pulses ist in Abbildung 3.29(b) gezeigt und Tabelle 3.9 zeigt die angepassten Parameter.



(a) Plot des frequenzmodulierten  $\pi$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI-FM-DEPH gemäß Ansatz (3.75)



(b) Plot des zeitlichen Verlaufs der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während 3-PI-FM-DEPH

Abbildung 3.29.: 3-PI-FM-DEPH

## $\frac{\pi}{2}$ -Puls

Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned}
 \Omega(t) = & b_1 \sin(2\pi x) + b_2 (\cos(2\pi x) - 1) \\
 & + b_3 \sin(4\pi x) + b_4 (\cos(4\pi x) - 1) \\
 & + b_5 \sin(6\pi x) + b_6 (\cos(6\pi x) - 1) \\
 & + b_7 \sin(8\pi x) + b_8 (\cos(8\pi x) - 1) \\
 & + b_9 \sin(10\pi x) + b_{10} (\cos(10\pi x) - 1)
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

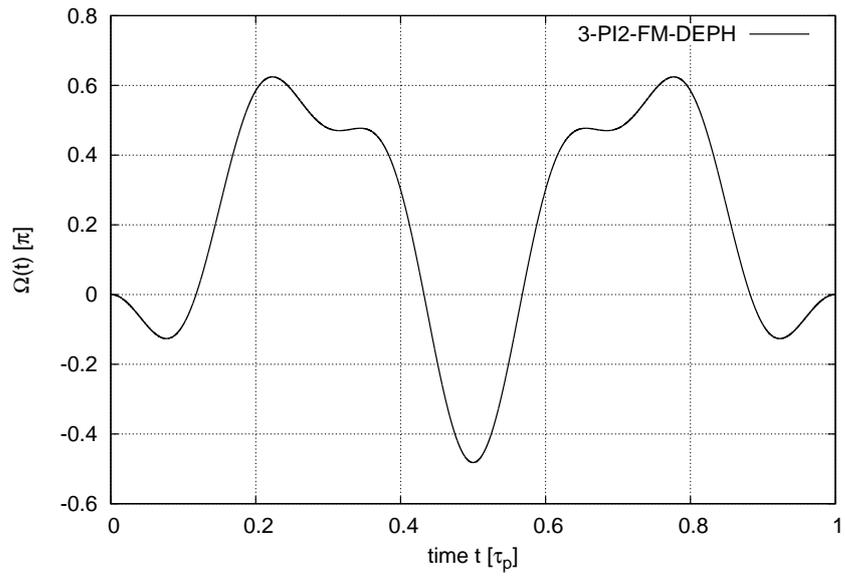
müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  somit die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 -a_y(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 a_x(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_y(x) a_z(x) dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 \cos(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x^2 dx &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{yz}(x_1) n_{zz}(x_2) - n_{zz}(x_1) n_{yz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{zz}(x_1) n_{xz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{zz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{xz}(x_1) n_{yz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{xz}(x_2) dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2n_{xz}(x_2) A_{13} - n_{xz}(x_3) A_{12} - n_{xz}(x_1) A_{32} dx_3 dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2n_{yz}(x_2) A_{13} - n_{yz}(x_3) A_{12} - n_{yz}(x_1) A_{32} dx_3 dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \int_0^1 \int_0^{x_1} \int_0^{x_2} 2n_{zz}(x_2) A_{13} - n_{zz}(x_3) A_{12} - n_{zz}(x_1) A_{32} dx_3 dx_2 dx_1 &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \psi(1) - \chi &\stackrel{!}{=} 0 \\
 \theta(1) - \frac{\pi}{2} &\stackrel{!}{=} 0,
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

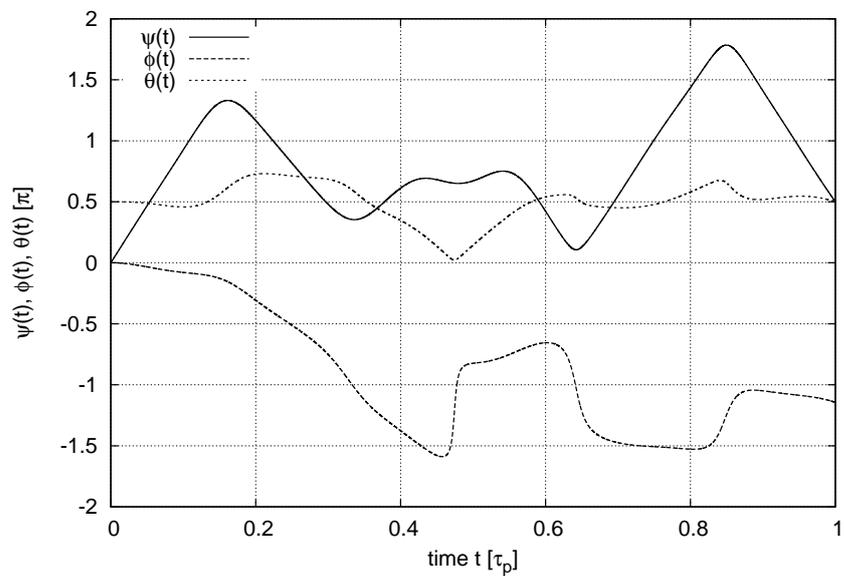
wobei  $\psi(1)$  und  $\theta(1)$  aus der Integration des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.59) folgt, mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur numerischen Integration von Differentialgleichungssystemen, zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der “GNU Scientific Library” (GSL), für Details zum Programmablauf siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls “3-PI2-FM-DEPH” gefunden. Er ist in Abbildung 3.30(a) geplottet, der zeitliche Verlauf der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während des Pulses ist in Abbildung 3.30(b) gezeigt und Tabelle 3.9 zeigt die angepassten Parameter.

3-PI-FM-DEPH	
Parameter	Wert
$V$	$13.85466726 \tau_p^{-1}$
$b_1$	$-3.267126838 \cdot 10^{-12}$
$b_2$	$0.2529758942$
$b_3$	$2.282197917 \cdot 10^{-12}$
$b_4$	$-1.31815197$
$b_5$	$1.593895636 \cdot 10^{-12}$
$b_6$	$0.2357994122$
$b_7$	$5.922151382 \cdot 10^{-13}$
$b_8$	$-0.281469874$
$b_9$	$-1.081176806 \cdot 10^{-12}$
$b_{10}$	$0.3803592476$
3-PI2-FM-DEPH	
Parameter	Wert
$V$	$14.71928215 \tau_p^{-1}$
$b_1$	$8.978005661 \cdot 10^{-13}$
$b_2$	$-0.04917470273$
$b_3$	$-4.100870659 \cdot 10^{-13}$
$b_4$	$-1.298922313$
$b_5$	$2.145782135 \cdot 10^{-14}$
$b_6$	$0.3439668532$
$b_7$	$2.426165428 \cdot 10^{-15}$
$b_8$	$-0.1086891232$
$b_9$	$3.02155127 \cdot 10^{-14}$
$b_{10}$	$0.4624540579$

Tabelle 3.9.: Tabelle der Parametrierung von frequenzmodulierten Lösungen dritter Ordnung bei reiner Dephasierung



(a) Plot des frequenzmodulierten  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI2-FM-DEPH gemäß Ansatz (3.77)



(b) Plot des zeitlichen Verlaufs der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während 3-PI2-FM-DEPH

Abbildung 3.30.: 3-PI2-FM-DEPH

## 4. Allgemeine Dekohärenz

Die Wahl des, das Bad modellierenden,  $\vec{\eta}(t)$  zusammen mit der Wahl zugelassener effektiver Drehachsen  $\vec{a}(t)$  für  $0 \leq t \leq \tau_p$  bestimmt, welche Matrixelemente aus der Drehmatrix  $\mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi)$  verschwinden oder zu Bedingungen beitragen, siehe Ausdruck (A.3). Gemäß  $\vec{n}_{\vec{\eta}}(t) = \mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi) \cdot \vec{\eta}(t)$ , siehe Gleichung (2.25), ergeben sich so zusammen mit den Gleichungen (2.27), (2.28) und (2.29) aus der Magnus-Entwicklung und den statistischen Eigenschaften sowie den Beziehungen der beteiligten Zufallsprozesse zueinander, siehe Gleichungen (2.14) und (2.16), die zu erfüllenden Bedingungen.

Für den Fall, dass allgemeine Dekohärenz modelliert werden soll gilt

$$\vec{\eta}(t) = \begin{pmatrix} \eta_x(t) \\ \eta_y(t) \\ \eta_z(t) \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

das klassische Bad koppelt also an alle Komponenten des Spins, statt wie im Fall von reiner Dephasierung nur an die  $z$ -Komponente.

### 4.1. Frequenzmodulation

Für die Frequenzmodulation werden zeitlich veränderliche Rotationsachsen wie zuvor für frequenzmodulierte Pulse bei reiner Dephasierung gemäß Gleichung (3.57) durch  $\theta(t)$  und  $\phi(t)$  parametrisiert zugelassen. Mit diesem Ansatz für die Zeitabhängigkeit der Rotationsachse und einem erneut wie bereits zuvor gemäß Gleichung (3.58) angesetzten Puls folgt aus dem impliziten Differentialgleichungssystem Gleichung (A.2) das explizite System gekoppelter Differentialgleichungen gemäß den Gleichungen (3.59). Auch die Anfangsbedingungen ergeben sich analog wie zuvor zu Gleichung (3.60).

Mit der Parametrierung der Drehachse gemäß den Gleichungen (3.57) resultieren dann

mit

$$\begin{aligned}
\vec{n}_{\vec{\eta}}(t) &= \begin{pmatrix} n_{xx}(t) & n_{xy}(t) & n_{xz}(t) \\ n_{yx}(t) & n_{yy}(t) & n_{yz}(t) \\ n_{zx}(t) & n_{zy}(t) & n_{zz}(t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} n_{xz}(t) \\ n_{yz}(t) \\ n_{zz}(t) \end{pmatrix} \\
&= \eta_x(t) \begin{pmatrix} n_{xx}(t) \\ n_{yx}(t) \\ n_{zx}(t) \end{pmatrix} + \eta_y(t) \begin{pmatrix} n_{xy}(t) \\ n_{yy}(t) \\ n_{zy}(t) \end{pmatrix} + \eta_z(t) \begin{pmatrix} n_{xz}(t) \\ n_{yz}(t) \\ n_{zz}(t) \end{pmatrix} \\
&:= \eta_x(t) \vec{x} + \eta_y(t) \vec{y} + \eta_z(t) \vec{z},
\end{aligned} \tag{4.2}$$

wobei  $n_{ij}(t)$  Matrixelemente der Drehmatrix (siehe (A.3)) bezeichnen, folgende Ausdrücke für frequenzmodulierte Pulse bei allgemeiner Dekohärenz.

**In erster Ordnung in  $\tau_p$**  ergibt sich mit den Gleichungen (4.1) und (3.57) aus dem ersten Term der Magnus-Entwicklung im allgemeinen Fall, siehe Gleichung (2.27),

$$\begin{aligned}
\mu^{(1)} &= \int_0^{\tau_p} \vec{n}_{\vec{\eta}}(t) \vec{\sigma} dt \\
&= \int_0^{\tau_p} (\eta_x(t) \vec{x} + \eta_y(t) \vec{y} + \eta_z(t) \vec{z}) \vec{\sigma} dt.
\end{aligned}$$

Mit den statistischen Eigenschaften der stochastischen Prozesse gemäß Gleichung (2.14) verschwinden die  $\eta_x$ - und  $\eta_y$ -Terme und es folgt in erster Ordnung

$$= \bar{\eta}_z \int_0^{\tau_p} \begin{pmatrix} n_{xz}(t) \\ n_{yz}(t) \\ n_{zz}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} dt,$$

so resultiert mit

$$\begin{aligned}
\mu^{(1)} &= \bar{\eta}_z \sigma_x \int_0^{\tau_p} -a_y(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x(t) a_z(t) dt \\
&\quad + \bar{\eta}_z \sigma_y \int_0^{\tau_p} a_x(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_y(t) a_z(t) dt \\
&\quad + \bar{\eta}_z \sigma_z \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x^2 dt
\end{aligned} \tag{4.3}$$

eine exakte Reproduktion der zu erfüllenden Bedingungen in erster Ordnung bei

reiner Dephasierung gemäß Gleichung (3.62).

**In zweiter Ordnung in  $\tau_p$**  ergibt sich mit den Gleichungen (4.1) und (3.57) aus dem zweiten Term der Magnus-Entwicklung im allgemeinen Fall, siehe Gleichung (2.28),

$$\begin{aligned}\mu^{(2)} &= 2i\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} (\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \times \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2)) dt_2 dt_1 \\ &= 2i\vec{\sigma} \sum_{k,l \in \{x,y,z\}} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \eta_k(t_1) \eta_l(t_2) [\vec{k}(t_1) \times \vec{l}(t_2)] dt_2 dt_1.\end{aligned}$$

Dazu wurde das Skalarprodukt ausmultipliziert. Mit den Autokorrelationsfunktionen in  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung gemäß Gleichungen (2.15) und den Kreuzkorrelationsfunktionen gemäß den Gleichungen (2.16) und (2.17) ergeben sich in zweiter Ordnung lediglich Beiträge aus den Diagonalelementen der Drehmatrix und es folgt

$$\begin{aligned}&= 2i\vec{\sigma}\sigma^2 \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} [\vec{x}(t_1) \times \vec{x}(t_2) + \vec{y}(t_1) \times \vec{y}(t_2)] dt_2 dt_1 \\ &\quad + 2i\vec{\sigma} (\vec{\eta}_z^2 + \sigma^2) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \vec{z}(t_1) \times \vec{z}(t_2) dt_2 dt_1\end{aligned}$$

in zweiter Ordnung. Ausschreiben der Kreuzprodukte führt dann in zweiter Ord-

nung schließlich auf

$$\begin{aligned}
\mu^{(2)} = & 2i\sigma_x\sigma^2 \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{yx}(t_1) n_{zx}(t_2) + n_{yy}(t_1) n_{zy}(t_2) \\
& - (n_{zx}(t_1) n_{yx}(t_2) + n_{zy}(t_1) n_{yy}(t_2)) dt_2 dt_1 \\
& + 2i\sigma_y\sigma^2 \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{zx}(t_1) n_{xx}(t_2) + n_{zy}(t_1) n_{xy}(t_2) \\
& - (n_{xx}(t_1) n_{zx}(t_2) + n_{xy}(t_1) n_{zy}(t_2)) dt_2 dt_1 \\
& 2i\sigma_z\sigma^2 \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{xx}(t_1) n_{yx}(t_2) + n_{xy}(t_1) n_{yy}(t_2) \\
& - (n_{yx}(t_1) n_{xx}(t_2) + n_{yy}(t_1) n_{xy}(t_2)) dt_2 dt_1 \\
& + 2i\sigma_x (\bar{\eta}_z^2 + \sigma^2) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{yz}(t_1) n_{zz}(t_2) - n_{zz}(t_1) n_{yz}(t_2) dt_2 dt_1 \\
& + 2i\sigma_y (\bar{\eta}_z^2 + \sigma^2) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{zz}(t_1) n_{xz}(t_2) - n_{xz}(t_1) n_{zz}(t_2) dt_2 dt_1 \\
& + 2i\sigma_z (\bar{\eta}_z^2 + \sigma^2) \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{xz}(t_1) n_{yz}(t_2) - n_{yz}(t_1) n_{xz}(t_2) dt_2 dt_1
\end{aligned} \tag{4.4}$$

mit den Matrixelementen  $n_{ij}(t)$  der Drehmatrix gemäß expliziter Repräsentation (A.3).

#### 4.1.1. Lösungen erster Ordnung

Die Gleichung (4.3) ist eine exakte Reproduktion des Ausdrucks in erster Ordnung bei reiner Dephasierung (3.62). Deshalb lösen die bereits gezeigten, frequenzmodulierten Lösungen 1-PI-FM-DEPH und 1-PI2-FM-DEPH auch bei allgemeiner Dekohärenz und sollen hier nicht erneut gezeigt werden. Sie sind in den Plots 3.25(a) und 3.25(b) bzw. 3.26(a) und 3.26(b) bereits gezeigt und Tabelle 3.7 zeigt ihre Parametrierung.

## 4.1.2. Lösungen zweiter Ordnung

Pulse zweiter Ordnung müssen neben den Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau_p} -a_y(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x(t) a_z(t) dt &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} a_x(t) \sin(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_y(t) a_z(t) dt &\stackrel{!}{=} 0 \\ \int_0^{\tau_p} \cos(\psi(t)) + (1 - \cos(\psi(t))) a_x^2 dt &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

gemäß Gleichung (4.3) und den Gleichungen

$$\begin{aligned} &\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{yx}(t_1) n_{zx}(t_2) + n_{yy}(t_1) n_{zy}(t_2) \\ &- (n_{zx}(t_1) n_{yx}(t_2) + n_{zy}(t_1) n_{yy}(t_2)) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0 \\ &\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{zx}(t_1) n_{xx}(t_2) + n_{zy}(t_1) n_{xy}(t_2) \\ &- (n_{xx}(t_1) n_{zx}(t_2) + n_{xy}(t_1) n_{zy}(t_2)) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0 \\ &\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{xx}(t_1) n_{yx}(t_2) + n_{xy}(t_1) n_{yy}(t_2) \\ &- (n_{yx}(t_1) n_{xx}(t_2) + n_{yy}(t_1) n_{xy}(t_2)) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0 \\ &\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{yz}(t_1) n_{zz}(t_2) - n_{zz}(t_1) n_{yz}(t_2) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0 \\ &\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{zx}(t_1) n_{xz}(t_2) - n_{xz}(t_1) n_{zx}(t_2) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0 \\ &\int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} n_{xz}(t_1) n_{yz}(t_2) - n_{xz}(t_1) n_{xz}(t_2) dt_2 dt_1 \stackrel{!}{=} 0, \end{aligned}$$

mit den Drehmatrizelementen  $n_{ij}(t)$ , gemäß Gleichung (4.4) zusätzlich die Gleichungen (3.65) und (3.66) erfüllen.

## $\pi$ -Pulse

Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned}\Omega(t) = & b_1 \sin(2\pi x) + b_2 (\cos(2\pi x) - 1) \\ & + b_3 \sin(4\pi x) + b_4 (\cos(4\pi x) - 1) \\ & + b_5 \sin(6\pi x) + b_6 (\cos(6\pi x) - 1) \\ & + b_7 \sin(8\pi x) + b_8 (\cos(8\pi x) - 1) \\ & + b_9 \sin(10\pi x) + b_{10} (\cos(10\pi x) - 1)\end{aligned}\tag{4.5}$$

müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  somit die einheitenlosen Gleichungen

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 -a_y(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x(x) a_z(x) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 a_x(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_y(x) a_z(x) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \cos(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x^2 dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{yx}(x_1) n_{zx}(x_2) + n_{yy}(x_1) n_{zy}(x_2) \\
& - (n_{zx}(x_1) n_{yx}(x_2) + n_{zy}(x_1) n_{yy}(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{zx}(x_1) n_{xx}(x_2) + n_{zy}(x_1) n_{xy}(x_2) \\
& - (n_{xx}(x_1) n_{zx}(x_2) + n_{xy}(x_1) n_{zy}(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \tag{4.6} \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{xx}(x_1) n_{yx}(x_2) + n_{xy}(x_1) n_{yy}(x_2) \\
& - (n_{yx}(x_1) n_{xx}(x_2) + n_{yy}(x_1) n_{xy}(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{yz}(x_1) n_{zz}(x_2) - n_{zz}(x_1) n_{yz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{zz}(x_1) n_{xz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{zz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{xz}(x_1) n_{yz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{xz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \psi(1) - \chi \stackrel{!}{=} 0 \\
& \theta(1) - \frac{\pi}{2} \stackrel{!}{=} 0,
\end{aligned}$$

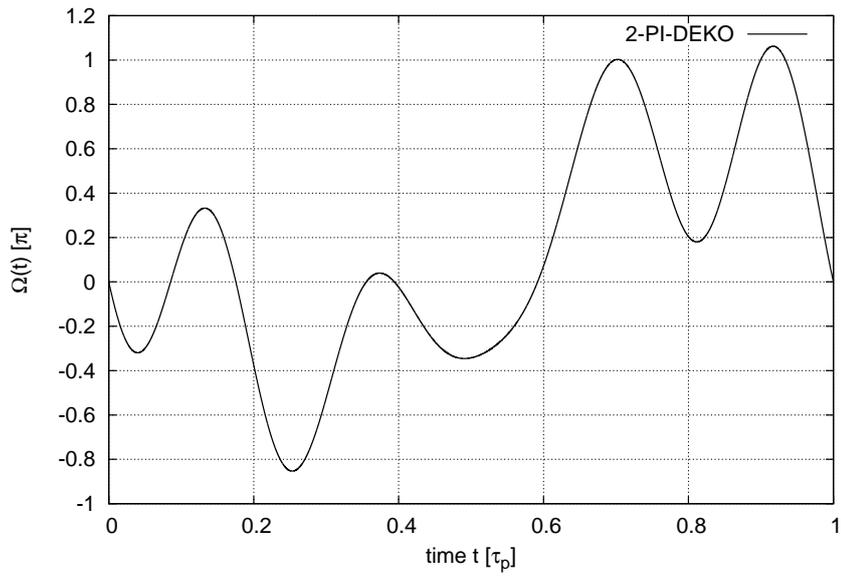
wobei  $\psi(1)$  und  $\theta(1)$  aus der Integration des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.59) folgt, mit  $\chi = \pi$  erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur numerischen Integration von Differentialgleichungssystemen, zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der ‘‘GNU Scientific Library’’ (GSL), für Details zum Programmablauf siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls ‘‘2-PI-DEKO’’ gefunden. Er ist

in Abbildung 4.1(a) geplottet, der zeitliche Verlauf der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während des Pulses ist in Abbildung 4.1(b) gezeigt und Tabelle 4.1 zeigt die angepassten Parameter.

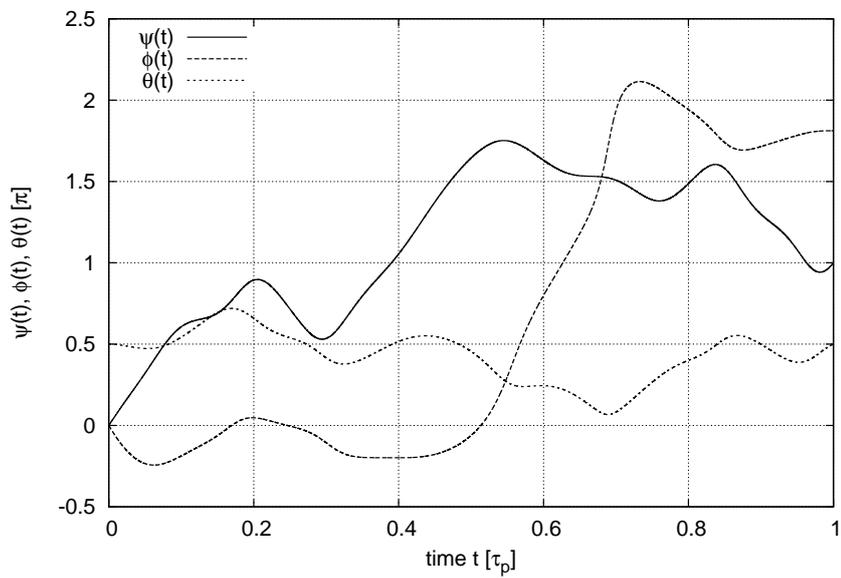
### $\frac{\pi}{2}$ -Pulse

Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned}\Omega(t) = & b_1 \sin(2\pi x) + b_2 (\cos(2\pi x) - 1) \\ & + b_3 \sin(4\pi x) + b_4 (\cos(4\pi x) - 1) \\ & + b_5 \sin(6\pi x) + b_6 (\cos(6\pi x) - 1) \\ & + b_7 \sin(8\pi x) + b_8 (\cos(8\pi x) - 1) \\ & + b_9 \sin(10\pi x) + b_{10} (\cos(10\pi x) - 1)\end{aligned}\tag{4.7}$$



(a) Plot des frequenzmodulierten  $\pi$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI-DEKO gemäß Ansatz (4.5)



(b) Plot des zeitlichen Verlaufs der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während 2-PI-DEKO

Abbildung 4.1.: 2-PI-DEKO

müssen nach der Substitution  $t = x\tau_p$  somit die einheitenlosen Gleichungen

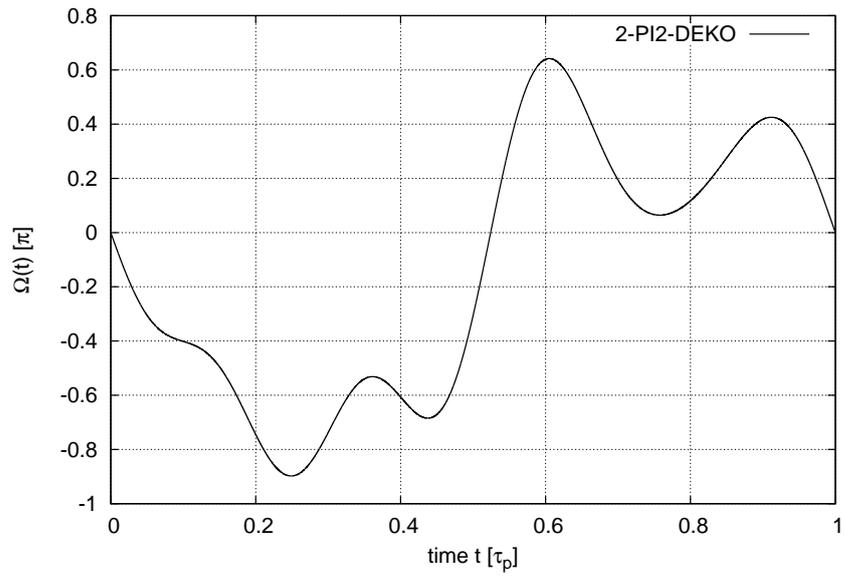
$$\begin{aligned}
& \int_0^1 -a_y(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x(x) a_z(x) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 a_x(x) \sin(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_y(x) a_z(x) dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \cos(\psi(x)) + (1 - \cos(\psi(x))) a_x^2 dx \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{yx}(x_1) n_{zx}(x_2) + n_{yy}(x_1) n_{zy}(x_2) \\
& - (n_{zx}(x_1) n_{yx}(x_2) + n_{zy}(x_1) n_{yy}(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{zx}(x_1) n_{xx}(x_2) + n_{zy}(x_1) n_{xy}(x_2) \\
& - (n_{xx}(x_1) n_{zx}(x_2) + n_{xy}(x_1) n_{zy}(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \tag{4.8} \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{xx}(x_1) n_{yx}(x_2) + n_{xy}(x_1) n_{yy}(x_2) \\
& - (n_{yx}(x_1) n_{xx}(x_2) + n_{yy}(x_1) n_{xy}(x_2)) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{yz}(x_1) n_{zz}(x_2) - n_{zz}(x_1) n_{yz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{zz}(x_1) n_{xz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{zz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \int_0^1 \int_0^{x_1} n_{xz}(x_1) n_{yz}(x_2) - n_{xz}(x_1) n_{xz}(x_2) dx_2 dx_1 \stackrel{!}{=} 0 \\
& \psi(1) - \chi \stackrel{!}{=} 0 \\
& \theta(1) - \frac{\pi}{2} \stackrel{!}{=} 0,
\end{aligned}$$

wobei  $\psi(1)$  und  $\theta(1)$  aus der Integration des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.59) folgt, mit  $\chi = \frac{\pi}{2}$  erfüllt werden. Mithilfe der Algorithmen zur numerischen Integration von Differentialgleichungssystemen, zur mehrdimensionalen Nullstellensuche und zur numerischen Integration aus der ‘‘GNU Scientific Library’’ (GSL), für Details zum Programmablauf siehe Abschnitt A.6, wurde so der Puls ‘‘2-PI2-DEKO’’ gefunden. Er

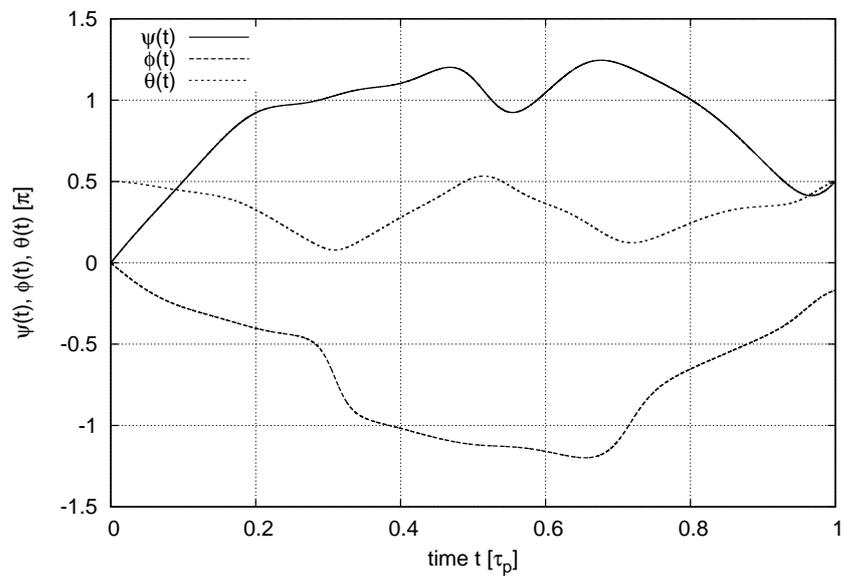
ist in Abbildung 4.2(a) geplottet, der zeitliche Verlauf der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während des Pulses ist in Abbildung 4.2(b) gezeigt und Tabelle 4.1 zeigt die angepassten Parameter.

2-PI-DEKO	
Parameter	Wert
$V$	$10.557107 \tau_p^{-1}$
$b_1$	$-1.607077698$
$b_2$	$0.6537364809$
$b_3$	$-0.1006096088$
$b_4$	$-0.1371809843$
$b_5$	$0.2137188192$
$b_6$	$0.3292681484$
$b_7$	$-0.8444775145$
$b_8$	$-0.7683989654$
$b_9$	$-0.5892392924$
$b_{10}$	$-0.4451065372$
2-PI2-DEKO	
Parameter	Wert
$V$	$8.484727858 \tau_p^{-1}$
$b_1$	$-1.834279415$
$b_2$	$0.1676184646$
$b_3$	$0.2804076917$
$b_4$	$0.4124756921$
$b_5$	$-0.5715199408$
$b_6$	$0.2382261544$
$b_7$	$0.1160697257$
$b_8$	$-0.444575314$
$b_9$	$-0.2515453355$
$b_{10}$	$0.07471054885$

Tabelle 4.1.: Tabelle der Parametrierung von frequenzmodulierten Lösungen zweiter Ordnung bei allgemeiner Dekohärenz



(a) Plot des frequenzmodulierten  $\frac{\pi}{2}$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-DEKO gemäß Ansatz (4.7)



(b) Plot des zeitlichen Verlaufs der Parametrierung der effektiven Rotationsachse während 2-PI2-DEKO

Abbildung 4.2.: 2-PI2-DEKO

## 5. Fazit & Ausblick

Generell wird erwartet, dass Pulse, die eine Entkopplung des Spins von einem klassischen Bad, wie es in dieser Arbeit betrachtet wurde, realisieren im Vergleich zu quantenmechanisch modellierten Bädern weniger Einschränkungen liefern und so auf kleinere Maximalamplituden und Pulse von einfacherer Struktur führen.

Ein Vergleich der gefundenen amplituden- bzw. frequenzmodulierten Pulse in erster Ordnung bei reiner Dephasierung zeigt Reproduktionen bereits bekannter Einschränkungen und damit auch der zugehörigen, bekannten Lösungen. Es handelt sich bei diesen Lösungen um die bekannten "CORPSE"- und "SCORPSE"-Pulse, wie in den Abbildungen 3.13, 3.14, 3.15 und 3.16 gezeigt. Die Reproduktion der Einschränkungen ist plausibel mit einer geometrischen Interpretation der Gleichungen in erster Ordnung zu verstehen. Diese besitzen letztlich die Proportionalitäten  $\propto \bar{\eta}_j \int_0^{\tau_p} n_{ij}(t) dt$  mit statischen Anteilen des ankoppelnden Bads in den Koeffizienten und Matrixelementen der Drehmatrix  $n_{ij}(t)$ . Diese Terme zeigen also eine Art "zeitliches Mittel" aller möglichen Rotationen der Kopplung, die von der physikalischen Eigenart der tatsächlich betrachteten Kopplung unabhängig ist, da mögliche Zeitabhängigkeiten erst in Termen höherer Ordnungen relevant werden. So ist plausibel, dass die hier gefundenen Pulse für ein als klassisch modelliertes Bad bei Amplitudenmodulation mit den Pulsen im Fall eines zeitunabhängigen Quantenbads [PKRU09] koinzidieren. Auch ist so plausibel zu erklären, dass der Fall von frequenzmodulierten Pulsen bei klassischem Bad in erster Ordnung die selben Einschränkungen wie im Fall eines zeitabhängigen Quantenbads [FPU12] reproduzieren.

In zweiter Ordnung zeigt sich die erwartete Reduktion der Einschränkungen im Fall eines als klassisch modellierten Bads gegenüber den Fällen von zeitunabhängigen und zeitabhängigen, quantenmechanischen Bädern. Die erwartete Absenkung des Betrags der Maximalamplitude der amplitudenmodulierten Pulse ist in den Abbildungen 3.17, 3.18, 3.19 und 3.20 dokumentiert. Die Absenkung der Amplituden frequenzmodulierter Pulse zweiter Ordnung kann außerdem dem Vergleich der, in dieser Arbeit für den Fall des klassischen Bads gefundenen, Amplituden aus Tabelle 3.8 und den Amplituden der Pulse zweiter Ordnung für ein zeitabhängiges Quantenbad [FPU12] entnommen werden.

Es ergeben sich Amplituden von  $\approx 12.8 \frac{1}{\tau_p}$  und  $\approx 8.4 \frac{1}{\tau_p}$  für  $\pi$ -Pulse, sowie  $\approx 12.3 \frac{1}{\tau_p}$  und  $\approx 9.4 \frac{1}{\tau_p}$  für  $\frac{\pi}{2}$ -Pulse. Auch die in zweiter Ordnung gefundene Reduktion der Einschränkungen ist plausibel aus dem klassischen Eigenschaften des hier betrachteten Bads zu begründen. Im zeitunabhängigen Fall des Quantenbads [PKRU09] resultieren die weiteren Einschränkungen letztendlich aus den Termen  $[\mathcal{H}_b, \bar{\mathcal{A}}_j]_- \neq 0$  und  $[\bar{\mathcal{A}}_j, \bar{\mathcal{A}}_k]_- \neq 0$ . Beide Terme resultieren aus den quantenmechanischen Eigenschaften der Kopplungsoperatoren  $\bar{\mathcal{A}}_i$  und der inneren Dynamik des quantenmechanischen Bads  $\mathcal{H}_b$ . Dabei besitzt der erste Kommutator im klassischen Fall wegen eines fehlenden Analogons für die Baddynamik  $\mathcal{H}_b$  keine Entsprechung und folgt für  $\mathcal{H}_b := 0$  oder den klassischen Eigenschaften von  $\eta(t)$  aus dem quantenmechanischen Fall, während für den zweiten Kommutator offensichtlich  $[\eta(t_1), \eta(t_2)]_- = 0$  gilt. Eine weitere Möglichkeit Terme in zweiter Ordnung in  $\tau_p$  zu erzeugen ist ein linearer Anteil einer zeitlichen Abhängigkeit des Erwartungswerts  $\bar{\eta}(t)$  des betrachteten stochastischen Prozesses. Tatsächlich wird bei dem hier betrachteten Modell aber eine Kurzzeitentwicklung in  $\tau_p$  vorgenommen. Deshalb ist es plausibel von einem stationären stochastischen Prozess während  $[0, \tau_p]$  und damit von einem zeitunabhängigen Erwartungswert  $\bar{\eta}$  auszugehen. Eben diese Zeitunabhängigkeit des Erwartungswerts erklärt auch den Verlust der im Fall des zeitabhängigen Quantenbads [FPU12] zusätzlich gefundenen Terme zweiter Ordnung proportional zu  $-i\mathcal{A}_{j1}$ . Dabei markiert die 1 in dem Index die Herkunft des Terms aus dem linearen Teil der Zeitabhängigkeit des betrachteten Kopplungsoperators  $\mathcal{A}(t)$ .

Weiterhin resultiert der moderate Zuwachs der Bedingungen in dritter Ordnung neben der bereits erwähnten Zeitunabhängigkeit des Erwartungswerts des stochastischen Prozesses aus der angesetzten, typischen Form der Autokorrelationsfunktion wie in Abbildung 2.1 skizziert. Die fehlende lineare Komponente in der Entwicklung erzeugt keinen weiteren Beitrag zu Bedingungen in dritter Ordnung.

Es wurden auch hier nicht gezeigte, simultane amplituden- und frequenzmodulierte Pulse gefunden. Die Amplitudenmodulation wurde dabei genutzt um Ein- und Ausschalteffekten durch endlich schnelles Steigen und Fallen der Pulsamplitude am Intervallbeginn und -ende Rechnung zu tragen.

Insgesamt ist zu resümieren, dass die gefundenen Pulse die Erwartungen an die Verringerung der Maximalamplituden ab zweiter Ordnung erfüllen und entsprechend der Reduktion der zu erfüllenden Gleichungen auch mitunter von erheblich einfacherer Gestalt sind als ihre quantenmechanischen Pendanten. In Experimenten, die Pulse in höherer als der ersten Ordnung benötigen und deshalb nicht mehr auf den "CORPSE"- und "SCORPSE"-Pulsen beruhen können, stellen die gefundenen Pulse deshalb eine Wahl

dar, die eine Verbesserung gegenüber der bisherigen, quantenmechanischen Vorschläge erwarten lässt. Insbesondere im Fall simultan amplituden- und frequenzmodulierter Pulse erlauben es die neuen Vorschläge aus dieser Arbeit als Bestandteil entsprechender RUDD-Sequenzen mit ihrer durch die berücksichtigten An- und Abschalt effekte größeren Nähe zu real implementierbaren Pulsen eine bessere Unterdrückung der Dekohärenz zu erwarten.

# A. Appendix

## A.1. Zusammenhang zwischen Pulsformen und effektiven Rotationsachsen und -winkeln

Die Schrödingergleichung für den Puls (2.21) führt über die folgende Differentialgleichung einen Zusammenhang zwischen Pulsform  $\vec{v}(t)$ , effektiver Rotationsachse  $\vec{a}(t)$  und effektivem Rotationswinkel  $\psi(t)$  ein. Die freie Rotationsachse wird durch

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\phi) \\ \sin(\theta) \sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

mit Hilfe normierter Kugelkoordinaten parametrisiert. Die Schrödingergleichung ist

$$\begin{aligned} i\partial_t \mathcal{P}_t &= \mathcal{H}_0(\tau) \mathcal{P}_\tau \\ \Leftrightarrow i\partial_t \mathcal{P}_t &= \vec{v}(t) \vec{\sigma} \mathcal{P}_t, \end{aligned}$$

mit den expliziten Repräsentationen

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_t &= \exp \left\{ -i \vec{\sigma} \vec{a}(t) \frac{\psi(t)}{2} \right\} = \cos \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) - i (\vec{\sigma} \vec{a}(t)) \sin \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) \\ \mathcal{P}_t^{-1} &= \exp \left\{ -i \vec{\sigma} \vec{a}(t) \frac{\psi(t)}{2} \right\} = \cos \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) + i (\vec{\sigma} \vec{a}(t)) \sin \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) \end{aligned}$$

folgt

$$\partial_t \mathcal{P}_t = \frac{\psi'(t)}{2} \left[ -\sin \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) - i (\vec{\sigma} \vec{a}(t)) \cos \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) \right] - i (\vec{\sigma} \vec{a}'(t)) \sin \left( \frac{\psi(t)}{2} \right).$$

Wird dieser Ausdruck auf der linken Seite der Schrödingergleichung eingesetzt und die Gleichung anschließend von rechts mit  $\mathcal{P}_t^{-1}$  multipliziert folgt, mit zur Übersichtlichkeit ausgelassenen Zeitabhängigkeiten,

$$\left\{ \frac{\psi'}{2} \left[ -i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) + (\vec{\sigma} \vec{a}) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) \right] + (\vec{\sigma} \vec{a}') \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \right\} \hat{P}_t^{-1} = \vec{v} \vec{\sigma}.$$

Mit explizitem  $\mathcal{P}_t^{-1}$  und Ausmultiplizieren des Produkts

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{\psi'}{2} \left[ -i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) + (\vec{\sigma} \vec{a}) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) \right] + (\vec{\sigma} \vec{a}') \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \right\} \times \\ & \times \left\{ \cos \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) + i (\vec{\sigma} \vec{a}(t)) \sin \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) \right\} \end{aligned}$$

folgt für das Produkt

$$\begin{aligned} & - \frac{\psi'}{2} i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) + \frac{\psi'}{2} \cos^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) + \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}') + \\ & + \frac{\psi'}{2} \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) + i (\vec{\sigma} \vec{a}) (\vec{\sigma} \vec{a}) \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) + i \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}') (\vec{\sigma} \vec{a}) \\ = & - \frac{\psi'}{2} i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) + \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}') + \\ & + i (\vec{\sigma} \vec{a}) (\vec{\sigma} \vec{a}) \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) + i \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}') (\vec{\sigma} \vec{a}). \end{aligned}$$

Mit  $(\vec{n} \vec{\sigma}) \cdot (\vec{m} \vec{\sigma}) = \vec{m} \vec{n} + i \vec{\sigma} (\vec{m} \times \vec{n})$  für  $[\vec{m}, \vec{\sigma}] = [\vec{n}, \vec{\sigma}] = 0$  und den aus (A.1) folgenden Eigenschaften  $\vec{a} \vec{a} = 1$ ,  $\vec{a} \vec{a}' = 0$  folgt dann

$$\begin{aligned} & - \frac{\psi'}{2} i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) + \frac{\psi'}{2} \cos^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) + \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}') + \\ & + \frac{\psi'}{2} \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) + i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) \frac{\psi'}{2} (\vec{a} \vec{a}) \\ & - \vec{\sigma} \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) \frac{\psi'}{2} (\vec{a} \times \vec{a}) + i \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{a}' \vec{a}) - \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) \vec{\sigma} (\vec{a}' \times \vec{a}) \\ = & - \frac{\psi'}{2} i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) + \frac{\psi'}{2} \cos^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) + \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}') + \\ & + \frac{\psi'}{2} \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) + i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) \frac{\psi'}{2} - \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) \vec{\sigma} (\vec{a}' \times \vec{a}). \end{aligned}$$

Mit den Additionstheoremen  $\sin^2(\alpha) + \cos^2(\alpha) = 1$ ,  $2 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \sin(\alpha)$  und  $\sin^2(\alpha) = \frac{1}{2}(1 - \cos(\alpha))$  folgt für das Produkt

$$\begin{aligned}
& \underbrace{-\frac{\psi'}{2} i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) \frac{\psi'}{2}}_0 \\
& + \underbrace{\frac{\psi'}{2} \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{a}) + \frac{\psi'}{2} \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{a})}_{\frac{\psi'}{2} (\vec{\sigma}\vec{a})} + \underbrace{\sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{a}')}_{\frac{1}{2} \sin(\psi)} + \\
& + \underbrace{-\sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{\sigma}(\vec{a}' \times \vec{a})}_{\frac{1}{2}(1 - \cos(\frac{\psi}{2}))} \\
& = \frac{\psi'}{2} (\vec{\sigma}\vec{a}) + \frac{1}{2} \sin(\psi) (\vec{\sigma}\vec{a}') - \frac{1}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{\psi}{2}\right)\right) \vec{\sigma}(\vec{a}' \times \vec{a}).
\end{aligned}$$

Damit gilt für die Schrödingergleichung

$$\begin{aligned}
& \frac{\psi'}{2} (\vec{\sigma}\vec{a}) + \frac{1}{2} \sin(\psi) (\vec{\sigma}\vec{a}') - \frac{1}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{\psi}{2}\right)\right) \vec{\sigma}(\vec{a}' \times \vec{a}) = \vec{\sigma}\vec{v} \\
\Rightarrow \psi'(t) \vec{a}(t) + \sin(\psi(t)) \vec{a}'(t) - (1 - \cos(\psi(t))) (\vec{a}'(t) \times \vec{a}(t)) &= 2\vec{v}(t), \quad (\text{A.2})
\end{aligned}$$

was das Ergebnis aus [PU08] exakt reproduziert.

## A.2. Expliziter Ausdruck für $\mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi)$

Mit der expliziten Form von  $\vec{n}_{\vec{a}}(t)$  lässt sich die folgende Repräsentation für die Matrix  $\mathcal{D}_{\vec{a}}(-\psi)$  finden

$$\begin{pmatrix} \cos \psi + (1 - \cos \psi) a_x^2 & a_z \sin \psi + (1 - \cos \psi) a_x a_y & -a_y \sin \psi + (1 - \cos \psi) a_x a_z \\ -a_z \sin \psi + (1 - \cos \psi) a_x a_y & \cos \psi + (1 - \cos \psi) a_y^2 & a_x \sin \psi + (1 - \cos \psi) a_y a_z \\ a_y \sin \psi + (1 - \cos \psi) a_x a_z & -a_x \sin \psi + (1 - \cos \psi) a_y a_z & \cos \psi + (1 - \cos \psi) a_z^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

wobei die Zeitabhängigkeiten  $\psi(t)$  und  $\vec{a}(t)$  zur besseren Übersicht ausgelassen wurden.

### A.3. Rechnung zur Herleitung einer expliziten Form von $\tilde{H}(t)$

Mit expliziten

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_t &= \exp \left\{ -i \vec{\sigma} \vec{a}(t) \frac{\psi(t)}{2} \right\} = \cos \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) - i (\vec{\sigma} \vec{a}(t)) \sin \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) \\ \mathcal{P}_t^{-1} &= \exp \left\{ -i \vec{\sigma} \vec{a}(t) \frac{\psi(t)}{2} \right\} = \cos \left( \frac{\psi(t)}{2} \right) + i (\vec{\sigma} \vec{a}(t)) \sin \left( \frac{\psi(t)}{2} \right)\end{aligned}$$

folgt mit zur Übersichtlichkeit ausgelassenen Zeitabhängigkeiten  $\vec{a}(t)$ ,  $\psi(t)$  und  $\vec{\eta}(t)$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}(\tau) &= \mathcal{P}_\tau^{-1} \mathcal{H}(\tau) \mathcal{P}_\tau \\ &= \left[ \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) - i (\vec{\sigma} \vec{a}) \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \right] (\vec{\eta} \vec{\sigma}) \left[ \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) + i (\vec{\sigma} \vec{a}) \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \right].\end{aligned}$$

Ausmultiplizieren führt auf der rechten Seite auf

$$\begin{aligned}& \cos^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{\eta}) - i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{\eta}) (\vec{\sigma} \vec{a}) \\ & + i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) (\vec{\sigma} \vec{\eta}) + \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) (\vec{\sigma} \vec{\eta}) (\vec{\sigma} \vec{a}) \\ & = \cos^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{\eta}) + i \sin \left( \frac{\psi}{2} \right) \cos \left( \frac{\psi}{2} \right) \underbrace{\left( (\vec{\sigma} \vec{a}) (\vec{\sigma} \vec{\eta}) - (\vec{\sigma} \vec{\eta}) (\vec{\sigma} \vec{a}) \right)}_A \\ & + \sin^2 \left( \frac{\psi}{2} \right) (\vec{\sigma} \vec{a}) (\vec{\sigma} \vec{\eta}) (\vec{\sigma} \vec{a}).\end{aligned}$$

Mit  $(\vec{n} \vec{\sigma}) \cdot (\vec{m} \vec{\sigma}) = \vec{n} \vec{m} + i \vec{\sigma} (\vec{n} \times \vec{m})$  gilt

$$A = \vec{a} \vec{\eta} + i \vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{\eta}) - \vec{\eta} \vec{a} + i \vec{\sigma} (\vec{\eta} \times \vec{a}) = 2i \vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{\eta})$$

und

$$\begin{aligned}
& \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{a}) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) (\vec{\sigma}\vec{a}) \\
&= \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) [\vec{a}\vec{\eta} + i\vec{\sigma}(\vec{a} \times \vec{\eta})] (\vec{\sigma}\vec{a}) \\
&= \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A \\
&\quad + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) [\vec{a}\vec{\eta}(\vec{\sigma}\vec{a}) + i\vec{\sigma}(\vec{a} \times \vec{\eta})(\vec{\sigma}\vec{a})] \\
&= \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A \\
&\quad + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta}(\vec{\sigma}\vec{a}) + i \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \left[ \underbrace{(\vec{a} \times \vec{\eta})\vec{a}}_0 + i\vec{\sigma}((\vec{a} \times \vec{\eta}) \times \vec{a}) \right] \\
&= \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A \\
&\quad + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta}(\vec{\sigma}\vec{a}) - \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{\sigma}((\vec{a} \times \vec{\eta}) \times \vec{a})
\end{aligned}$$

folgt.

Mit der Graßmann-Identität oder BAC-CAB-Regel und der Antikommutativität des Kreuz-Produktes folgt

$$\begin{aligned}
& \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A \\
&\quad + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta}(\vec{\sigma}\vec{a}) - \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{\sigma}((\vec{a} \times \vec{\eta}) \times \vec{a}) \\
&= \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A \\
&\quad + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta}(\vec{\sigma}\vec{a}) + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{\sigma}\left(\vec{a}(\vec{a}\vec{\eta}) - \vec{\eta}(\underbrace{\vec{a}\vec{a}}_1)\right) \\
&= \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A \\
&\quad + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta}(\vec{\sigma}\vec{a}) + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{\sigma}\vec{a}(\vec{a}\vec{\eta}) - \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}).
\end{aligned}$$

Mit  $2 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \sin(\alpha)$ ,  $2 \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) = 1 + \cos(\alpha)$ ,  $2 \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) = 1 - \cos(\alpha)$  und  $A$  wird daraus

$$\begin{aligned}
& \cos^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) + i \sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) A \\
& + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta} (\vec{\sigma}\vec{a}) + \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{\sigma}\vec{a} (\vec{a}\vec{\eta}) - \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) (\vec{\sigma}\vec{\eta}) \\
& = \frac{1}{2} (1 + \cos(\psi)) (\vec{\eta}\vec{\sigma}) - \frac{1}{2} (1 - \cos(\psi)) (\vec{\eta}\vec{\sigma}) - \sin(\psi) \vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{\eta}) \\
& + 2 \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta} (\vec{\sigma}\vec{a}) \\
& = \cos(\psi) \vec{\sigma}\vec{\eta} - \sin(\psi) \vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{\eta}) + 2 \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta} (\vec{\sigma}\vec{a}) \\
& = \left[ \cos(\psi) \vec{\eta} - \sin(\psi) (\vec{a} \times \vec{\eta}) + 2 \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \vec{a}\vec{\eta}\vec{a} \right] \vec{\sigma}
\end{aligned}$$

## A.4. Explizite Berechnung der Korrektur in dritter Ordnung $\mu^{(3)}$

Ausgehend von

$$\begin{aligned}
\mu^{(3)} &= \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \left[ [\tilde{\mathcal{H}}_{t_1}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_2}], \tilde{\mathcal{H}}_{t_3} \right] + \left[ \tilde{\mathcal{H}}_{t_1}, [\tilde{\mathcal{H}}_{t_2}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_3}] \right] dt_3 dt_2 dt_1 \\
&= \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \left[ [\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{\sigma}, \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \vec{\sigma}], \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \vec{\sigma} \right] \\
&\quad + [\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_1) \vec{\sigma}, [\vec{n}_{\vec{\eta}}(t_2) \vec{\sigma}, \vec{n}_{\vec{\eta}}(t_3) \vec{\sigma}]] dt_3 dt_2 dt_1
\end{aligned}$$

ergibt sich mit  $[\tilde{\mathcal{H}}_{t_i}, \tilde{\mathcal{H}}_{t_j}] = 2i\vec{\sigma} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_i} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_j})$ , wie bei der zweiten Ordnung in Gleichung (2.28) errechnet, auf der rechten Seite

$$= 2i \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \left[ \vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \vec{\sigma}, \vec{\sigma} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_3}) \right] + \left[ \vec{\sigma} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}), \vec{n}_{\vec{\eta},t_3} \vec{\sigma} \right] dt_3 dt_2 dt_1.$$

Ausmultiplizieren der Kommutatoren führt auf

$$\begin{aligned}
&= 2i \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \vec{\sigma}) \cdot ((\vec{n}_{\vec{\eta}, t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3}) \vec{\sigma}) - ((\vec{n}_{\vec{\eta}, t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3}) \vec{\sigma}) \cdot (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \vec{\sigma}) \\
&\quad + ((\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_2}) \vec{\sigma}) \cdot (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_3} \vec{\sigma}) - (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_3} \vec{\sigma}) \cdot ((\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_2}) \vec{\sigma}) \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Mit  $(\vec{m} \vec{\sigma}) \cdot (\vec{n} \vec{\sigma}) = \vec{m} \vec{n} + i \vec{\sigma} (\vec{m} \times \vec{n})$  ergibt sich dann

$$\begin{aligned}
&= 2i \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad \vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3}) + i \vec{\sigma} (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \times (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3})) \\
&\quad - (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3}) \vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} - i \vec{\sigma} ((\vec{n}_{\vec{\eta}, t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3}) \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_1}) \\
&\quad + (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_2}) \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3} + i \vec{\sigma} ((\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_2}) \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3}) \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta}, t_3} (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_2}) - i \vec{\sigma} (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_3} \times (\vec{n}_{\vec{\eta}, t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta}, t_2})) \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

Nach Wegheben der Spatproduktterme mit paarweise gegensetzlichen Vorzeichen und dem Herausziehen des gemeinsamen, konstanten Koeffizienten  $i\vec{\sigma}$  vor das Integral bleibt

$$\begin{aligned}
&= -2\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad \vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times (\vec{n}_{\vec{\eta},t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_3}) - (\vec{n}_{\vec{\eta},t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_3}) \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \\
&\quad + (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_3} - \vec{n}_{\vec{\eta},t_3} \times (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1 \\
&= -2\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad \vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times (\vec{n}_{\vec{\eta},t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_3}) + \vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times (\vec{n}_{\vec{\eta},t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_3}) \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta},t_3} \times (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) - \vec{n}_{\vec{\eta},t_3} \times (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1 \\
&= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad \vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times (\vec{n}_{\vec{\eta},t_2} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_3}) - \vec{n}_{\vec{\eta},t_3} \times (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \times \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

stehen. Nutzen der Grassman-Identität bzw. BAC-CAB-Regel führt dann schließlich auf

$$\begin{aligned}
&= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad \vec{n}_{\vec{\eta},t_2} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \vec{n}_{\vec{\eta},t_3}) - \vec{n}_{\vec{\eta},t_3} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) \\
&\quad - \vec{n}_{\vec{\eta},t_1} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_3} \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) + \vec{n}_{\vec{\eta},t_2} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_3} \vec{n}_{\vec{\eta},t_1}) \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1 \\
&= -4\vec{\sigma} \int_0^{\tau_p} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \\
&\quad 2\vec{n}_{\vec{\eta},t_2} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \vec{n}_{\vec{\eta},t_3}) - \vec{n}_{\vec{\eta},t_3} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_1} \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) - \vec{n}_{\vec{\eta},t_1} (\vec{n}_{\vec{\eta},t_3} \vec{n}_{\vec{\eta},t_2}) \\
&\quad dt_3 dt_2 dt_1.
\end{aligned}$$

## A.5. Programmablauf zur numerischen Lösung mit Hilfe der Algorithmen aus “SciPy”

Für sämtliche Programme wurde SciPy in der Version 0.9.0 mit Python 2.7 verwendet. Die komplette Dokumentation zu Scipy kann [com11] entnommen werden. Sämtliche Programme sind im Wesentlichen mehrdimensionale Nullstellensuchen durch den, mit `scipy.optimize.fsolve(lambda Prmtr: fctns(Theta, Prmtr), InitPrmtr, full_output = True)` aufgerufenen, Python-Wrapper für die Routinen “hybrd” und “hybrj” aus MINPACK. Der so verwendete Wrapper beruht auf dem Standardverhalten von MINPACK, was auch die Abbruchbedingung der Nullstellensuche umfasst (siehe MINPACK-Doku [Bee11]). Die aufgerufene Funktion `fctns(Theta, Prmtr)` implementiert in den Programmen die zu lösenden, in den jeweiligen Abschnitten explizit angegebenen, Gleichungssysteme. Für asymmetrische Komposit-Pulse erster Ordnung wäre `lambda Prmtr: fctns(Theta, Prmtr)` zum Beispiel durch

```
def fctns(Theta, prmtr):
    print prmtr, "—>"
    rslt = [ eta11(prmtr), eta12(prmtr), N(Theta, prmtr) ]
    print rslt
    return rslt
```

implementiert.

Bei stückweise konstanten Pulsen werden die nach Nullstellen zu untersuchenden Ausdrücke, wie `eta11(prmtr)`, `eta12(prmtr)` und `N(Theta, prmtr)` im Beispiel oben, durch Ausnutzen der stückweisen konstanten Amplituden analytisch exakt berechnet. Durch die stückweise konstanten Amplituden resultieren stückweise lineare  $\psi(t)$ , was eine stückweise analytische Integration erlaubt. Dazu werden die Integrationsgebiete an den Umschaltzeiten aufgetrennt und die Integration wird in jedem dieser Untergebiete mit einer analytisch gebildeten Stammfunktion durchgeführt. Die Ergebnisse aller Untergebiete dieser Partition werden dann zum Gesamtergebnis aufaddiert. Analog wird dieses Vorgehen auf entsprechend komplizierteren Integrationsgebieten und unterschiedlichen analytischen Mehrfachintegrationen in den erzeugten Untergebieten bis in die dritte Ordnung fortgesetzt.

Bei kontinuierlichen Pulsen wird zur Berechnung der zu untersuchenden Ausdrücke, wie `eta11(prmtr)`, `eta12(prmtr)` und `N(Theta, prmtr)` im Beispiel oben, der QUADPACK-Wrapper `scipy.integrate.quad()` verwendet. Als Beispiel für einen solchen Aufruf soll

```
def eta11(Theta, prmtr):
    """first order, first equation"""
    return sp.integrate.quad(lambda x: sin(Psi(Theta, x, prmtr)), 0, 1)[0]
```

dienen. Der so gestartete Algorithmus berechnet das Integral adaptiv bis der absolute oder relative Fehler von  $\approx 1.5 \cdot 10^{-8}$  unterschritten wird. Für die in höheren Dimensionen auftretenden Mehrfachintegrale wird dieser adaptive `quad`-Algorithmus mit entsprechenden oberen Grenzen verschachtelt aufgerufen.

## A.6. Programmabläufe zur numerischen Lösung mit Hilfe der Algorithmen aus der “GNU Scientific Library” (GSL)

Sämtliche Programme wurden mit der GSL in der Version 1.15 geschrieben und wurden mit dem `g++`-Compiler in Version 4.6.3 übersetzt. Die GSL-Dokumentation ist unter [Tea11] zu finden.

### A.6.1. Programmablauf für kontinuierliche, amplitudenmodulierte Pulse in dritter Ordnung

Wie bereits die SciPy-Programme sind auch die GSL-Programme im Wesentlichen mehrdimensionale Nullstellensuchen. Diese wurden stets mit

```
gsl_multiroot_function f = {&fnctns, n, params};
T = gsl_multiroot_fsolver_hybrids;
s = gsl_multiroot_fsolver_alloc (T, n);
gsl_multiroot_fsolver_set (s, &f, x);
```

initialisiert. Dabei wählt `T = gsl_multiroot_fsolver_hybrids`; den zu verwendenden, in diesem Fall einen zu “hybrid” aus MINPACK ähnlichen, Algorithmus mit interner Skalierung, und `x` ist ein Vektor mit den zuvor gewählten Startparametern für die Nullstellensuche. Die Iterationen der Nullstellensuche werden dann gemäß

```
do
{
    iter++;
    status = gsl_multiroot_fsolver_iterate(s);
    print_state(iter, s);
    if (status) {break;}
    status = gsl_multiroot_test_residual(s->f, 1e-10);
}
while (status == GSL_CONTINUE);
```

ausgeführt bis die Summe der Beträge der Ausdrücke, und damit die Abweichung zu einem exakten Nullpunkt, kleiner als  $10^{-10}$  sind.

Wie zuvor ist `&fctns` ein Verweis auf das zu untersuchende Gleichungssystem. Für asymmetrische, kontinuierliche, amplitudenmodulierte Pulse dritter Ordnung ergibt sich zum Beispiel

```
int fctns(const gsl_vector* x, void* params, gsl_vector* f)
{
    double prmtr[5] = { gsl_vector_get(x, 0), gsl_vector_get(x, 1),\
        gsl_vector_get(x, 2), gsl_vector_get(x, 3), gsl_vector_get(x, 4) };
    gsl_vector_set(f, 0, eta11(prmtr));
    gsl_vector_set(f, 1, eta12(prmtr));
    gsl_vector_set(f, 2, eta2(prmtr));
    gsl_vector_set(f, 3, eta3z(prmtr));
    gsl_vector_set(f, 4, eta3x(prmtr));

    return GSL_SUCCESS;
}
```

für die Gleichungen. Die Integrationen wurden, wenn nötig erneut durch verschachtelte Aufrufe, mit `gsl_integration_qag()` gelöst. Zum Beispiel sei hier

```
double eta11(double* prmtr)
{
    double rslt, abserr;

    gsl_integration_workspace* wrkspc = gsl_integration_workspace_alloc(50);

    gsl_function fctn;
    fctn.function = &eta11_integrand;
    fctn.params = prmtr;

    gsl_integration_qag(&fctn, 0, 1, 1e-12, 0, 50, 6, wrkspc, &rslt, &abserr);

    gsl_integration_workspace_free(wrkspc);

    return rslt;
}
```

zeigt. Dieser Aufruf bewirkt eine adaptive, abschnittsweise Integration gemäß 61 Punkte Gauss-Kronrod-Regel. Dazu wird solange der Integrationsabschnitt mit dem größten ermittelten Fehler erneut geteilt bis ein globaler, absoluter Fehler von  $10^{-12}$  unterschritten wird.

## A.6.2. Programmablauf für frequenzmodulierte Pulse

Auch die Programme zum Auffinden frequenzmodulierter Pulse sind im Wesentlichen mehrdimensionale Nullstellensuchen. Diese wurden erneut stets mit

```
gsl_multiroot_function f = {&fctns, n, params};
T = gsl_multiroot_fsolver_hybrids;
s = gsl_multiroot_fsolver_alloc(T, n);
```

```
gsl_multiroot_fsolver_set (s, &f, x);
```

initialisiert. Dabei wählt `T = gsl_multiroot_fsolver_hybrids`; den zu verwendenden, in diesem Fall einen zu “hybrd” aus MINPACK ähnlichen, Algorithmus mit interner Skalierung, und `x` ist ein Vektor mit den zuvor gewählten Startparametern für die Nullstellensuche. Die Iterationen der Nullstellensuche werden dann gemäß

```
do
{
    iter++;
    status = gsl_multiroot_fsolver_iterate(s);
    print_state(iter, s);
    if (status) {break;}
    status = gsl_multiroot_test_residual(s->f, 1e-10);
}
while (status == GSL_CONTINUE);
```

ausgeführt bis die Summe der Beträge der Ausdrücke, und damit die Abweichung zu einem exakten Nullpunkt, kleiner als  $10^{-10}$  sind.

Wie zuvor ist `&fncfns` auch hier ein Verweis auf das zu untersuchende Gleichungssystem. Für asymmetrische, frequenzmodulierte Pulse erster Ordnung ergibt sich bei reiner Dephasierung zum Beispiel

```
int fncfns(const gsl_vector* x, void* params, gsl_vector* f) {
    // solves ODE for given set of parameters:
    ode_params ode_prmtr = {gsl_vector_get(x, 0), {gsl_vector_get(x, 1),\
    gsl_vector_get(x, 2), gsl_vector_get(x, 3), gsl_vector_get(x, 4)}};
    int multi_state = do_ode(ode_prmtr);

    // evaluates constraints
    gsl_vector_set(f, 0, eta_11());
    gsl_vector_set(f, 1, eta_12());
    gsl_vector_set(f, 2, eta_13());
    gsl_vector_set(f, 3, N());
    gsl_vector_set(f, 4, plane());

    return multi_state;
}
```

für das Gleichungssystem. Der wesentliche Unterschied zu dem bisherigen Vorgehen bei Amplitudenmodulation ist der vorangehende Aufruf von `do_ode(ode_prmtr)`. Diese Funktion integriert das explizite Differentialgleichungssystem mittels Runge-Kutta-Verfahren in vierter Ordnung. Die Schrittgröße wird dabei adaptiv gewählt, so dass der lokale Fehler in jedem Schritt zwischen dem 0.5- und 1.1-fachen des geforderten, absoluten lokalen Fehlers von  $10^{-15}$  liegt. Zur Ermittlung des lokalen Fehlers wird die Doppelschrittmethode herangezogen. Anschließend erzeugt die Funktion mit Hilfe von kubischen Splines interpolierte Objekte für  $\psi(t)$ ,  $\phi(t)$  und  $\theta(t)$ . So wird für die gegebenen Parameter in

jeder Iteration das Differentialgleichungssystem gelöst und mit der so resultierenden Zeitabhängigkeit der effektiven Drehachse  $\vec{a}(t)$  die numerische Integration der Bedingungen wie gehabt, beispielsweise gemäß

```

double eta_11_integrand(double t, void* params) {
    return -a_y(t)*gsl_sf_sin(Psi(t)) + (1.0-gsl_sf_cos(Psi(t)))*a_x(t)*a_z(t);
}

double eta_11() {
    // set up integration, integrate:
    double rslt, abserr;
    gsl_integration_workspace* wrkspc = gsl_integration_workspace_alloc(1000);
    gsl_function fctn;
    fctn.function = &eta_11_integrand;
    fctn.params = NULL;
    cout << "eta_11:□" << gsl_strerror(gsl_integration_qag(&fctn, 0.0, 1.0,\
    1e-12, 0.0, 1000, 6, wrkspc, &rslt, &abserr)) << endl;
    gsl_integration_workspace_free(wrkspc);

    return rslt;
}

```

durchgeführt. Es wird also erneut die adaptive, abschnittsweise Integration gemäß 61 Punkte Gauss-Kronrod-Regel gewählt. Bei dieser Integration wird der Integrationsabschnitt mit dem größten ermittelten Fehler erneut geteilt bis ein globaler, absoluter Fehler von  $10^{-12}$  unterschritten wird.

# Tabellenverzeichnis

3.1. Tabelle der Parametrierung von kontinuierlichen Lösungen erster Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	39
3.2. Tabelle der Parametrierung von kontinuierlichen Lösungen erster Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	46
3.3. Tabelle der Parametrierung von kontinuierlichen Lösungen dritter Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	53
3.4. Tabelle der Parametrierung von Komposit-Lösungen erster Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	62
3.5. Tabelle der Parametrierung von Komposit-Lösungen zweiter Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	68
3.6. Tabelle der Parametrierung von Komposit-Lösungen dritter Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	79
3.7. Tabelle der Parametrierung von frequenzmodulierten Lösungen erster Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	87
3.8. Tabelle der Parametrierung von frequenzmodulierten Lösungen zweiter Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	94
3.9. Tabelle der Parametrierung von frequenzmodulierten Lösungen dritter Ordnung bei reiner Dephasierung . . . . .	99
4.1. Tabelle der Parametrierung von frequenzmodulierten Lösungen zweiter Ordnung bei allgemeiner Dekohärenz . . . . .	111

# Abbildungsverzeichnis

1.1. Skizze einer typischen Autokorrelationsfunktion . . . . .	5
2.1. Skizze einer typischen Autokorrelationsfunktion . . . . .	15
3.1. Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen $\pi$ -Pulses erster Ordnung 1-PI-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.8) . . . . .	31
3.2. Plot des kontinuierlichen, symmetrischen $\pi$ -Pulses erster Ordnung 1-PI-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.10) . . . . .	33
3.3. Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Pulses erster Ordnung 1-PI2-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.12) . . . . .	35
3.4. Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Pulses erster Ordnung 1-PI2-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.14) . . . . .	38
3.5. Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen $\pi$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.16) . . . . .	41
3.6. Plot des kontinuierlichen, symmetrischen $\pi$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.18) . . . . .	42
3.7. Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.20) . . . . .	44
3.8. Plot des kontinuierlichen, symmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.22) . . . . .	45
3.9. Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen $\pi$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.24) . . . . .	49
3.10. Plot des kontinuierlichen, symmetrischen $\pi$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.26) . . . . .	50
3.11. Plot des kontinuierlichen, asymmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI2-ASYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.28) . . . . .	52
3.12. Plot des kontinuierlichen, symmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Pulses dritter Ordnung 3-PI2-SYM-KONT-DEPH gemäß Ansatz (3.30) . . . . .	54

3.13. Plot des asymmetrischen $\pi$ -Komposit-Pulses erster Ordnung 1-PI-ASYM-KOMP-DEPH (CORPSE) gemäß Ansatz (3.33) . . . . .	56
3.14. Plot des symmetrischen $\pi$ -Komposit-Pulses erster Ordnung 1-PI-SYM-KOMP-DEPH (SCORPSE) gemäß Ansatz (3.35) . . . . .	58
3.15. Plot des asymmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses erster Ordnung 1-PI2-ASYM-KOMP-DEPH (CORPSE) gemäß Ansatz (3.37) . . . . .	60
3.16. Plot des symmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses erster Ordnung 1-PI2-SYM-KOMP-DEPH (SCORPSE) gemäß Ansatz (3.39) . . . . .	61
3.17. Plot des asymmetrischen $\pi$ -Komposit-Pulses zweiter Ordnung 2-PI-ASYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.41) und seinem gestrichelt dargestellten Analogon bei quantenmechanischem Bad . . . . .	64
3.18. Plot des symmetrischen $\pi$ -Komposit-Pulses zweiter Ordnung 2-PI-SYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.43) und seinem gestrichelt dargestellten Analogon bei quantenmechanischem Bad . . . . .	65
3.19. Plot des asymmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-ASYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.45) und seinem gestrichelt dargestellten Analogon bei quantenmechanischem Bad . . . . .	67
3.20. Plot des symmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses zweiter Ordnung 2-PI2-SYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.47) und seinem gestrichelt dargestellten Analogon bei quantenmechanischem Bad . . . . .	69
3.21. Plot des asymmetrischen $\pi$ -Komposit-Pulses dritter Ordnung 3-PI-ASYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.49) . . . . .	72
3.22. Plot des symmetrischen $\pi$ -Komposit-Pulses dritter Ordnung 3-PI-SYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.51) . . . . .	74
3.23. Plot des asymmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses dritter Ordnung 3-PI2-ASYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.53) . . . . .	76
3.24. Plot des symmetrischen $\frac{\pi}{2}$ -Komposit-Pulses dritter Ordnung 3-PI2-SYM-KOMP-DEPH gemäß Ansatz (3.55) . . . . .	78
3.25. 1-PI-FM-DEPH . . . . .	86
3.26. 1-PI2-FM-DEPH . . . . .	88
3.27. 2-PI-FM-DEPH . . . . .	91
3.28. 2-PI2-FM-DEPH . . . . .	93
3.29. 3-PI-FM-DEPH . . . . .	97
3.30. 3-PI2-FM-DEPH . . . . .	100
4.1. 2-PI-DEKO . . . . .	109

4.2. 2-PI2-DEKO . . . . .	112
---------------------------	-----

# Literaturverzeichnis

- [Bee11] Nelson H. F. Beebe. Documentation for minpack. <http://www.math.utah.edu/software/minpack.html#documentation>, 2011. Online abgerufen am 28. April 2012.
- [CanLNDS08] Łukasz Cywiński, Roman M. Lutchyn, Cody P. Nave, and S. Das Sarma. How to enhance dephasing time in superconducting qubits. *Phys. Rev. B*, 77:174509, May 2008.
- [Cha83] S. Chaturvedi. Gaussian stochastic processes. In *Stochastic Processes Formalism and Applications*. Springer Berlin / Heidelberg, 1983.
- [com11] The Scipy community. Scipy v0.9 reference guide. <http://docs.scipy.org/doc/scipy-0.9.0/reference/>, 2011. Online abgerufen am 28. April 2012.
- [FPU12] Benedikt Fauseweh, Stefano Pasini, and Götz S. Uhrig. Frequency-modulated pulses for quantum bits coupled to time-dependent baths. *Phys. Rev. A*, 85:022310, Feb 2012.
- [Gar83] C. W. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods*. Springer Berlin / Heidelberg / New York / Tokyo, 1983.
- [Hah50] E. L. Hahn. Spin echoes. *Phys. Rev.*, 80:580–594, Nov 1950.
- [Iss18] L. Isserli. On a formula for the product-moment coefficient of any order of a normal frequency distribution in any number of variables. 1918.
- [Jac10] K. Jacobs. *Stochastic Processes for Physicists: Understanding Noisy Systems*. Cambridge University Press, 2010.
- [KMB<sup>+</sup>08] Pekko Kuopanportti, Mikko Möttönen, Ville Bergholm, Olli-Pentti Saira, Jun Zhang, and K. Birgitta Whaley. Suppression of  $1/f^\alpha$  noise in one-qubit systems. *Phys. Rev. A*, 77:032334, Mar 2008.

- [Lev01] M.H. Levitt. *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*. John Wiley & Sons, 2001.
- [Mag54] W. Magnus. On the exponential solution of differential equations for a linear operator. *Comm. Pure Appl. Math.*, 7:649–673, 1954.
- [MdSZW06] Mikko Möttönen, Rogerio de Sousa, Jun Zhang, and K. Birgitta Whaley. High-fidelity one-qubit operations under random telegraph noise. *Phys. Rev. A*, 73:022332, Feb 2006.
- [NC00] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- [Pap91] A. Papoulis. *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes*. MacGraw-Hill, Inc., 1991.
- [PFKU08] S. Pasini, T. Fischer, P. Karbach, and G. S. Uhrig. Optimization of short coherent control pulses. *Phys. Rev. A*, 77:032315, Mar 2008.
- [PKRU09] S. Pasini, P. Karbach, C. Raas, and G. S. Uhrig. Optimized pulses for the perturbative decoupling of a spin and a decoherence bath. *Phys. Rev. A*, 80:022328, Aug 2009.
- [PU08] S. Pasini and G. S. Uhrig. Generalization of short coherent control pulses: extension to arbitrary rotations. *JOURNAL OF PHYSICS A: MATHEMATICAL AND THEORETICAL*, 2008.
- [Tea11] The GSL Team. Gnu scientific library – reference manual. [http://www.gnu.org/software/gsl/manual/html\\_node/index.html](http://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/index.html), 2011. Online abgerufen am 29. April 2012.
- [Uhr07] Götz S. Uhrig. Keeping a quantum bit alive by optimized  $\pi$ -pulse sequences. *Phys. Rev. Lett.*, 98:100504, Mar 2007.
- [UP10] Götz S Uhrig and Stefano Pasini. Efficient coherent control by sequences of pulses of finite duration. *New Journal of Physics*, 12:045001, Apr 2010.
- [VC05] L. M. K. Vandersypen and I. L. Chuang. Nmr techniques for quantum control and computation. *Rev. Mod. Phys.*, 76:1037–1069, Jan 2005.

- [VL98] Lorenza Viola and Seth Lloyd. Dynamical suppression of decoherence in two-state quantum systems. *Phys. Rev. A*, 58:2733–2744, Oct 1998.
- [WFL10] Jacob R. West, Bryan H. Fong, and Daniel A. Lidar. Near-optimal dynamical decoupling of a qubit. *Phys. Rev. Lett.*, 104:130501, Apr 2010.

# Danksagung

# Erklärung