

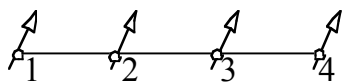
2P021

量子スピン系におけるダイナミクスについての 理論的研究

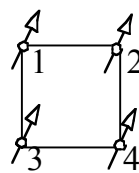
(阪大院理¹、阪大極限²) ○藪下高広¹、庄司光男¹、北河康隆¹、
川上貴資¹、奥村光隆¹、山口兆²

【序】情報処理デバイスにおける集積化の限界が見えてきているが、さらなる処理速度の高速化や低消費電力が要求されている。そのためには、現在の半導体微細加工技術（ナノテクノロジー）を超え、量子現象を用いた新しい量子デバイスの新規開発が不可欠である。そのため現在、NMR や ESR、コヒーレント光を用いた量子系の探索や、必要となる分子デバイスなど新規物質開発、合成が盛んに行われている。例えばスピン系では、スピン源に核スピンや電子スピンを用い、光や磁場によって量子位相を制御することによって量子演算を可能としている。その際、特に実験上問題となるのがデコヒーレンスなどの緩和である。デコヒーレンスは演算回数を決める重要な因子であり、いかにデコヒーレンスが少ない量子系を作り出すかが、例えば g 因子の分子設計上、重要な問題になっている。

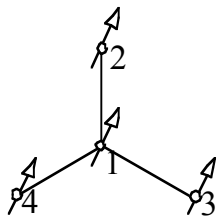
我々はこれまで分子集合体におけるエキシトン-フォノンダイナミクスやスピン系における量子スピンダイナミクスの研究を行ってきた[1, 2]。本研究では量子系のダイナミクスを解析するため、数値シミュレーションによる解析をおこなった。



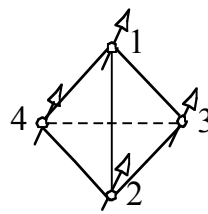
(A)



(B)



(C)



(D)

まずスピンが交換相互作用や磁気双極子相互作用によって磁氣的に相互作用している四スピン系 (Fig.1) の外部磁場下での量子ダイナミクスをおこなった。この四スピン系において緩和ダイナミクスを実行し、スピン構造とコヒーレンス、デコヒーレンスの関係について研究を進めた。

また単分子磁石など分子デバイスでは大きな磁気異方が望まれる。そのため、磁気双極子相互作用を持つスピン系でのスピン構造探索も行った。

Fig. 1 計算に用いたスピン構造 (A)直線型 (B) 長方形型 (C) 星型 (D)ピラミット型

【方法】

以下の量子リウビル方程式を四段四次のルンゲクッタ法で時間発展させ、密度行列の時間発展を行った。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [\hat{H}(t), \rho(t)] - i\hat{\Gamma} \rho(t) \quad (1)$$

ここで右辺の第2項目は緩和項である。緩和項（行列）は熱的平衡状態になるように決めた。初期値は熱的平衡状態を用い、磁場パルス $\pi/2$ をかけ、FID シグナルを求めた。

【結果】

Fig2 に各スピン構造における磁化の時間変化を示した。スピン構造によってコヒーレンスの振動が異なっていることが分かる。緩和現象によるデコヒーレンスにより磁化(S_z)の回復が起こっている。緩和の大きさを変えることによって磁化の緩和が大きく変化している(Fig3)。また減衰も指数関数的でなく、緩和現象が単経路では無いことを表している。計算の詳細や議論について当日発表を行う。

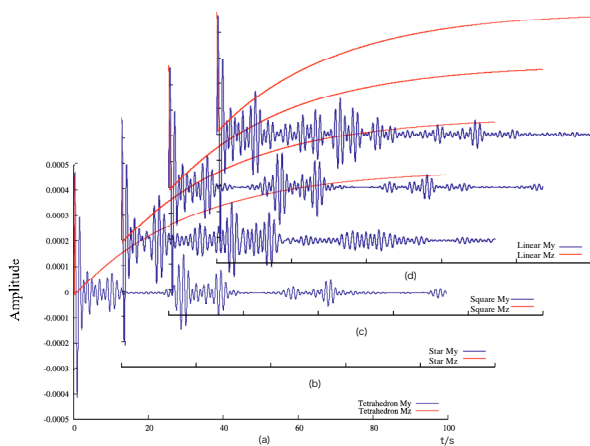


Fig. 2 四スピン系におけるコヒーレンス振動(青線)とデコヒーレンス(赤線)。

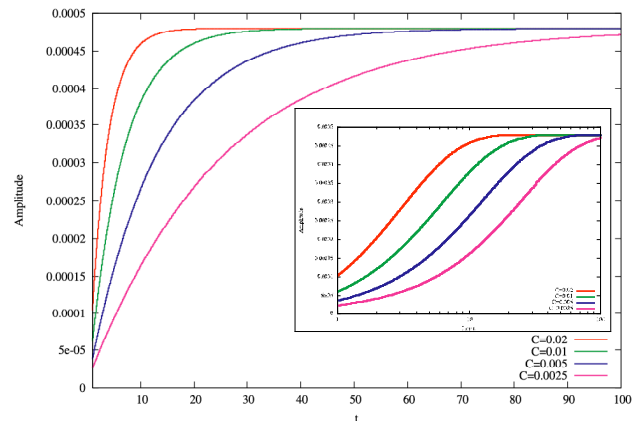


Fig. 3 四スピン系における緩和係数が異なる場合における磁化の回復(S_z)の変化。中のグラフは片指数対数表示。

【参考文献】

- [1] M. Takahata, et al, Int. J. Quantum. Chem. 105, 615 (2005).
- [2] M. Takahata, et al, Polyhedron 24, 2653 (2005).