

2P091

多スピン系のスピンドイナミクスに関する理論的研究

(阪大院・理)○新田 浩也、庄司 光男、武田 亮、山中 秀介、奥村 光隆、山口 兆

【序】近年、量子デバイスの発展において多スピン系の量子制御が重要になっている。例えば量子コンピュータへの応用がある。現在の NMR を用いた量子コンピュータでは分子の核スピンを量子スピンとし、外部磁場パルスで演算操作している^[1]。

これまで我々の研究グループでは、スピン系の緩和現象についていくつか研究発表を行っており^[2,3]、前年の分子構造討論会では現象論的な緩和パラメータを用いたスピン緩和のシミュレーションについて発表した。今回、我々はスピン系とボソン熱浴との相互作用をとり入れたスピン緩和^[2]のシミュレーション結果について発表する。パルス磁場印加後の時間発展を、緩和の効果を含むマスター方程式を用いてシミュレーションし、磁化の時間変化と緩和過程について議論する。

【方法】スピン系のハミルトニアン H_S 、熱浴のハミルトニアン H_R 、相互作用ハミルトニアン H_{SR} はそれぞれ以下の式で表される。

$$H_S = -\sum_{ij} 2J_{ij} I_i \cdot I_j - \gamma B_0 \sum_i (1 - \tilde{\sigma}_i) I_i^z \quad (1)$$

$$H_R = \sum_{ij} \sum_{q(i,j)} \Omega_{q(i,j)} c_{q(i,j)}^\dagger c_{q(i,j)} \quad (2)$$

$$H_{SR} = \sum_{ij} \sum_{q(i,j)} |i\rangle\langle j| \left(\kappa_{i,j,q(i,j)}^* c_{q(i,j)}^\dagger + \kappa_{i,j,q(i,j)} c_{q(i,j)} \right) \quad (3)$$

ここで I は角運動量演算子、 J はスピン間結合、 γ は磁気回転比、 B_0 は z 方向の外部磁場、 $\tilde{\sigma}$ は化学シフトを表す。また $c^\dagger \cdot c$ はボソンの生成・消滅演算子、 Ω_q はモード q のエネルギー、 κ は結合定数である。

系の基底ベクトルは各スピンサイトのスピン状態の直積で表され、スピン系のハミルトニアンに対して対角化されている。

$$|i\rangle = |\varphi_i^1\rangle \otimes |\varphi_i^2\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_i^N\rangle \quad (4a)$$

$$|\varphi_i^k\rangle = \begin{cases} |\alpha^k\rangle \\ |\beta^k\rangle \end{cases} \quad (4b)$$

$$H_S |\psi_\alpha\rangle = \omega_\alpha |\psi_\alpha\rangle = \omega_\alpha \sum_i C_{\alpha i} |i\rangle \quad (5)$$

以上のハミルトニアンを用いると、ボルン-マルコフ近似^[4]のもとで、スピン系の密度行列の時間発展は以下の式で表される^[2]。

$$\dot{\rho}_{\alpha\beta} = -i(\omega_\alpha - \omega_\beta) \rho_{\alpha\beta} - \sum_{mn} \Gamma_{\alpha\beta;mn} \rho_{mn} \quad (6a)$$

$$\dot{\rho}_{\alpha\alpha} = -\sum_m \Gamma_{\alpha\alpha;mm} \rho_{mm} \quad (6b)$$

緩和項は

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta;mn} = & \sum_k \sum_{ij} \left[\delta_{\beta n} \left\{ (1 - \delta_{ij}) C_{\alpha i}^* C_{k j} C_{k i}^* C_{m j} + C_{\alpha i}^* |C_{k j}|^2 C_{m i} \right\} \gamma_{(ij)} (\omega_m - \omega_k) \right. \\ & \left. + \delta_{\alpha m} \left\{ (1 - \delta_{ij}) C_{n i}^* C_{k j} C_{k i}^* C_{\beta j} + C_{n i}^* |C_{k j}|^2 C_{\beta i} \right\} \gamma_{(ij)} (\omega_m - \omega_k) \right] \\ & - \sum_{ii} \left\{ (1 - \delta_{ij}) C_{\alpha i}^* C_{m j} C_{n i}^* C_{\beta j} + C_{\alpha i}^* C_{m j} C_{n j}^* C_{\beta i} \right\} \left\{ \gamma_{(ij)} (\omega_m - \omega_\alpha) + \gamma_{(ij)} (\omega_n - \omega_\beta) \right\} \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\Gamma_{\alpha\beta, mn} = \delta_{\alpha m} \sum_k \sum_{ij} \left[2 \left\{ (1 - \delta_{ij}) C_{\alpha i}^* C_{kj} C_{ki}^* C_{\alpha j} + |C_{kj}|^2 |C_{\alpha i}|^2 \right\} \gamma_{(ij)}(\omega_m - \omega_k) \right. \\ \left. - \sum_{ij} \left[2 \left\{ (1 - \delta_{ij}) C_{\alpha i}^* C_{mj} C_{mi}^* C_{\alpha j} + |C_{mj}|^2 |C_{\alpha i}|^2 \right\} \gamma_{(ij)}(\omega_m - \omega_\alpha) \right] \right] \quad (7b)$$

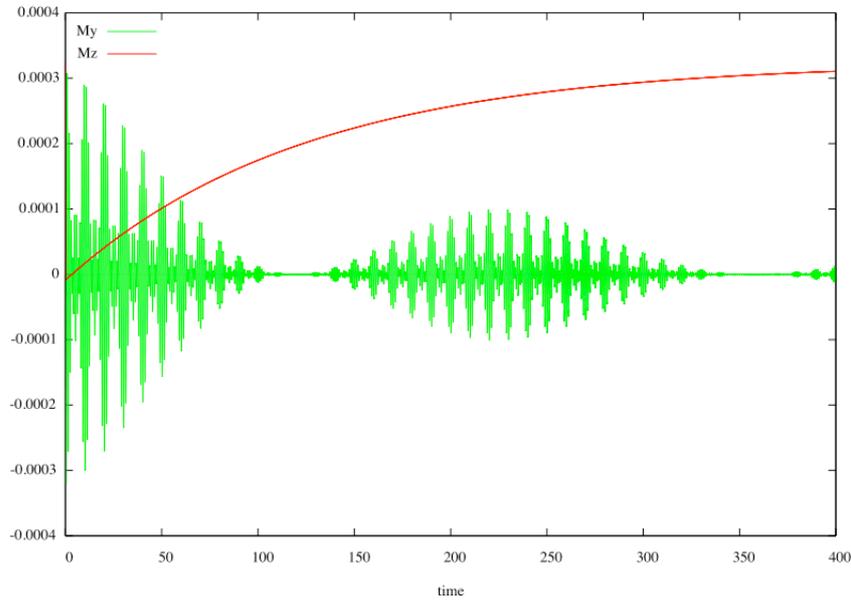
$$\gamma_{(ij)}(\omega) = \frac{2\gamma_{(ij)}^0}{1 + \exp(-\beta\omega)} \quad (8)$$

であり、 $\gamma_{(ij)}^0$ は $\gamma_{(ij)}(\omega)$ の高温極限值、 β は逆温度である。

これらの微分方程式を4段4次のルンゲクッタ法を用いて数値的に解いた。

【結果と考察】

下図にマスター方程式を用いて行った、3スピン系における $\pi/2$ パルス印加後の緩和のシミュレーション結果を示す。3スピン間の結合 J_{ij} は全て同じにおいた。



磁化ベクトルが $\pi/2$ パルスにより xy 平面に倒れた後、 z 成分(Mz)が回復していく様子が分かる。位相(My)の崩壊と再生は各スピンの化学シフトの違いから生じるものである。

また我々は、パルス演算^[1,5]についてもシミュレーションし、多スピン系のパルス磁場による制御と緩和について議論する。詳細は当日発表する。

【参考文献】

1. L. M. K. Vandersypen, I. L. Chuang, *Rev. Mod. Phys.*, **76**, 1037-1069 (2004)
2. M. Takahata, M. Shoji, S. Yamanaka, M. Nakano, K. Yamaguchi, *Polyhedron*, **24**, 2653-2657 (2005)
3. M. Takahata, M. Shoji, H. Nitta, R. Takeda, S. Yamanaka, M. Okumura, M. Nakano, K. Yamaguchi, *Int. J. Quantum Chem.*, **105**, 615-627 (2005)
4. H. J. Carmichael, *Statistical Methods in Quantum Optics 1*, Springer-Verlag.
5. C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, Springer-Verlag.