УДК 530.1

Горопашний О. І.

ДИНАМІКА СПІНА В ПОЛІ НЕЛІНІЙНОЇ ХВИЛІ

У цій роботі розглядається задача про динаміку спіна у дворівневій системі, яка має велике значення для розвитку квантової інформатики. Як змінне магнітне поле цієї дворівневої системи було обрано поле нелінійної хвилі (нелінійно модульоване поле Рабі). З математичної точки зору розв'язати рівняння Шредінґера в такому полі неможливо, тому конструюється певна схема для отримання аналітичних розв'язків, і ця схема дає точні розв'язки рівняння Шредінґера. Також у роботі проаналізовано умови резонансу в цьому полі, і вони є узагальненням умов резонансу в полі Рабі.

Ключові слова: спін, задача керування, магнітний резонанс.

Вступ

Дворівневі квантові системи є одними з найпростіших випадків квантово-механічних систем. Проте вони мають дуже широке застосування для багатьох задач квантової електроніки, нелінійної оптики та лазерної спектроскопії. Зокрема, це задача ядерно-магнітного резонансу (ЯМР) [1] та задачі керування. Актуальність останніх на сьогодні є дуже великою, адже задача про переведення спінової системи з одного стану в певний інший стан чи якунебудь суперпозицію є аналогічною до переведення зі стану 0 в стан 1 в обчислювальних приладах. Це дає змогу розглядати задачу керування як перший крок, який необхідно зробити для створення так званих квантових комп'ютерів, адже очевидно, що квантовий байт інформації (кубіт) має не лише два стани, як у звичайних комп'ютерах, але й безліч суперпозицій цих станів [2].

Проте задача спінової динаміки у залежних від часу магнітних полях не є новою. Уперше цю задачу було розглянуто в працях Гютінгера [3] та Майорани [4] на початку 30-х років минулого сторіччя. Пізніше вони знайшли експериментальне підтвердження в роботах Рабі [5], котрі було покладено в основу ЯМР, що стало поштовхом до досліджень у цій галузі. У подальшому цю теорію було розглянуто у великій кількості робіт різних дослідників, бо кожен міг обирати власний вигляд магнітного поля і намагатись розв'язувати задачу саме в ньому.

Об'єктом дослідження цієї роботи є дворівнева квантова система, що складається із закріпленого спіна, на який діє змінне в часі магнітне поле, причому в цій роботі це поле є нелінійним модульованим полем Рабі [6].

Предметом дослідження є конструювання розв'язку в цьому полі, адже, як показано в цій роботі, задача в такому полі призводить до системи диференціальних рівнянь з ірраціональними коефіцієнтами, для яких регулярні математичні методи теорії диференціальних рівнянь незастосовні.

Метою цієї роботи було дослідження задачі керування за допомогою нелінійного модульованого поля Рабі, яке містить амплітуду в термінах еліптичних функцій Якобі [7]. Також схему розв'язку можна буде застосовувати до подібних полів.

Основна частина

Постановка задачі. Розглядаємо дворівневу квантову систему, що складається з одного закріпленого спіна 1/2, на який діють магнітним полем. Гамільтоніан відповідної системи називають гамільтоніаном Паулі. Він має такий вигляд:

$$\hat{H} = (\vec{B}(t), \hat{\sigma}),$$

де $\vec{B}(t)$ — змінне магнітне поле, а $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_i$ — матриці Паулі.

Представимо хвильову функцію як суперпозицію двох амплітуд стану C_+ та C_-. Тобто

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix}$$

і, з умови нормування хвильової функції $\langle\psi|\psi\rangle$:

$$|C_+|^2 + |C_-|^2 = 1.$$

Отже, необхідно розв'язати систему двох диференціальних рівнянь першого порядку на амплітуди стану:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_z & B_x + iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix}.$$

Розв'язавши цю систему диференціальних рівнянь для довільного магнітного поля, можна отримати C_+ та C_-, а отже, і динаміку спіна в заданому магнітному полі, бо:

$$\langle\hat{S}_x\rangle = C_+{}^\dagger C_- + C_+C_-^\dagger,$$
$$\langle\hat{S}_y\rangle = i(C_+{}^\dagger C_- + C_-C_-^\dagger),$$
$$\langle\hat{S}_z\rangle = |C_+|^2 - |C_-|^2 = 2|C_+|^2 - 1.$$

У статті ми будемо розглядати таке поле, яке при різних значеннях параметрів відповідає декільком фізично важливим ситуаціям: нелінійно модульованому полю Рабі, N-солітонному імпульсу та лінійно поляризованому полю, що апроксимує гармонічне. Цьому відповідає магнітне поле

$$\vec{B} = \big(Nk\nu\mathrm{cn}(\nu t|k)\cos\omega t, Nk\nu\mathrm{cn}(\nu t|k)\sin\omega t, \omega_0\big),$$

де $\mathrm{cn}(\nu t|k)$ — еліптична функція Якобі (кноїд) [7]. Надалі вважатимемо, що N є цілим числом.

Підставляючи це поле в рівняння Шредінґера і використовуючи зручну заміну $s = \mathrm{sn}(\nu t|k)$, отримуємо таку систему диференціальних рівнянь:

$$\frac{d^2C_\pm}{ds^2} + \left[\frac{k^2 s}{1-k^2s^2} \mp \frac{i\Delta}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}}\right] \times \\ \times \frac{dC_\pm}{ds} + \frac{N^2k^2}{(1-k^2s^2)}C_\pm = 0, \quad (1)$$

де $\Delta = \omega_0 - \omega$ — параметр, що характеризує відмінність між частотами постійного поля та поперечного осцилюючого поля. На жаль, такі рівняння є важкорозв'язними через корінь $\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}$ в знаменнику. Для того щоб спростити цю задачу, можна розглянути два окремих випадки, коли можна позбутися цього кореня — це $\Delta = 0$ та $k = 1$.

Для початку розглянемо випадок $\Delta = 0$ — це є умовою резонансу в сенсі задачі Рабі. Тоді наше рівняння набуває вигляду

$$\frac{d^2C_\pm}{ds^2} + \frac{k^2s}{1-k^2s^2}\frac{dC_\pm}{ds} + \frac{N^2k^2}{(1-k^2s^2)}C_\pm = 0.$$

Це рівняння гіпергеометричого типу, розв'язком якого буде нескінченний гіпергеометричний ряд. Але, враховуючи, що N — ціле число, то цей ряд обривається. Отже, розв'язком для C_+ буде поліном Чебишева першого роду $C_+ = T_N(-ks)$ [8]. Аналогічно розв'язуючи рівняння на C_-, отримуємо $C_- = -i\sqrt{1-k^2s^2}U_{N-1}(-ks)$, де U_{N-1} — поліном Чебишева другого роду [8].

Тепер розглянемо другий граничний випадок $k = 1$. У цьому випадку еліптичні функції стають гіперболічними, тобто $Nk\nu\mathrm{cn}(\nu t|1) = \frac{N\nu}{\cosh\nu t}$. Тоді після заміни $s = \tanh\nu t$ наше рівняння матиме вигляд

$$(1-s^2)\frac{d^2C_+}{ds^2} - \left(s - \frac{i\Delta}{\nu}\right)\frac{dC_+}{ds} + N^2C_+ = 0.$$

Так само, як у випадку $\Delta = 0$, розв'язком такого рівняння буде гіпергеометричний ряд, що обривається внаслідок того, що N — ціле число. Отже, результатом буде поліном Якобі з комплексними параметрами $a = -(1-i\Delta)/2$, $b = -(1+i\Delta)/2$:

$$C_+ = P_N^{a,b}\left(\frac{1-\tanh\nu t}{2}\right).$$

Тут важливо зауважити, що початкову умову треба замінити на $C_+(-\infty) = 1$, $C_-(-\infty) = 0$, оскільки в цій границі поле є неперіодичним і його дія починається на $t = -\infty$.

Щодо резонансу в такому полі, то у випадку N-солітонного імпульсу ($k = 1$) єдиною умовою резонансу є $\nu = \omega_0$.

Схема побудови розв'язків. Спробуємо сконструювати розв'язок у загальному випадку. Можна помітити, що в рівнянні (1) ірраціональний коефіцієнт є множником при уявній одиниці, тому можна сподіватись, що у розв'язку він стоїть у фазі.

Користуючись цим спостереженням, спробуємо представити C_+ у вигляді

$$C_+ = \exp\left[\int_0^s\left(R_0(s') + i\frac{R_1(s')}{\sqrt{w^2}}\right)ds'\right],$$

де $w^2 = (1-s^2)(1-k^2s^2)$, а $R_0(s)$ і $R_1(s)$ — деякі раціональні функції від s. Підставляючи C_+ в такому вигляді у вихідне рівняння, можемо отримати систему двох рівнянь типу Ріккаті: $R_1' + R_1(2R_0 - \frac{s}{s^2-1}) - \Delta R_0 = 0$. Також можна побачити, що R_0 в термінах модуля амплітуди C_+ рівний: $R_0(s) = \frac{1}{2}\frac{d}{ds}\ln|C_+|^2$. Тепер необхідно вгадати, який вигляд має $|C_+|^2$. Враховуючи, що в обох граничних випадках розв'язками були поліноміальні функції, можна спробувати представити C_+ у вигляді:

$$|C_+|^2 = \mathcal{P}_{2N}(s, e_i) = \prod_{i=1}^n(s^2 - e_i^2),$$

де $\mathcal{P}_{2N}$ — це поліном порядку $2N$ з коренями e_i.

Тоді при фіксованому N ми матимемо поліном степеня $2N$, по ньому вираховуємо R_0. При відомому R_0 можна розв'язати друге рівняння системи, наведеної вище:

$$R_1(s) = \Delta\int_0^s e^{-\int_y^s[2R_0(x) - \frac{x}{x^2-1}]dx}R_0(y)dy.$$

Тоді перше рівняння буде слугувати умовою сумісності; з нього ми знайдемо корені полінома e_i.

Розглянемо випадок $N = 1$, тоді: $|C_+|^2 = s^2 - e^2$. Підставляючи це у формулу для R_0, можемо його обрахувати: $R_0(s) = \frac{s}{s^2-e_i^2}$, а також знайти R_1:

$$R_1(s) = \Delta\int_0^s e^{-\int_y^s[2R_0(x) - \frac{x}{x^2-1}]dx}R_0(y)dy = \\ = \Delta\frac{s^2-1}{s^2-e_i^2}. \quad (2)$$

Тепер, знаючи $R_0(s)$ та $R_1(s)$, можна підставити їх у рівняння

$$R_0' + R_0^2 - \frac{k^2s}{1-k^2s^2}R_0 + \frac{\Delta R_1 - R_1^2}{w^2} + \frac{N^2k^2}{1-k^2s^2} = 0.$$

Це рівняння на знаходження коренів e_i, за допомогою яких можна визначити амплітуди станів C_+ та C_-.

Знайдені розв'язки для C_+ мають вигляд:

$$C_+{}^{(1)} = \sqrt{s^2 - e_1^2}\mathrm{e}^{-i\varphi_1},$$
$$C_+{}^{(2)} = \sqrt{s^2 - e_2^2}\mathrm{e}^{-i\varphi_2},$$

де введено такі позначення:

$$e_{1,2}^2 = \left[(\Delta^2 - 1) \pm \frac{\sqrt{(\Delta^2-1)^2 + 4k^2\Delta^2}}{2k^2}\right],$$
$$\varepsilon_i = \frac{\sqrt{(-1)^{i+1}e_i^2}}{(e_1^2 - e_2^2)}, \qquad i = 1, 2,$$
$$\varphi_i = \Delta\left[\tau - \frac{1 - e_i^2}{e_i^2}\Pi\Big(\frac{-1}{e_i^2}; \tau, k\Big)\right],$$

а $\Pi\,(n;\tau,k) = \int_0^s [(1-nx^2)\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}]$ — еліптичний інтеграл третього роду.

Отже, розв'язком буде суперпозиція станів $C_+{}^{(1)}$ та $C_+{}^{(2)}$, яка повинна задовольняти початкові умови $C_+(0) = 0$ та $C_-(0) = 1$.

Остаточно маємо, що амплітуди стану, що описують спін 1/2, поміщений у поле $\vec{B} = \big(k\nu\mathrm{cn}(\nu t|k)\cos\omega t, k\nu\mathrm{cn}(\nu t|k)\sin\omega t, \omega_0\big)$, мають такий вигляд:

$$C_+ = \varepsilon_1\sqrt{\mathrm{sn}(\nu t|k)^2 + e_1^2}\,e^{-i\varphi_1} + \\ + \varepsilon_2\sqrt{-\mathrm{sn}(\nu t|k)^2 - e_2^2}\,e^{-i\varphi_2}, \quad (3)$$

$$C_- = -i\varepsilon_2\sqrt{\mathrm{sn}(\nu t|k)^2 + e_1^2}\,e^{i\varphi_1} + \\ + i\varepsilon_1\sqrt{-\mathrm{sn}(\nu t|k)^2 - e_2^2}\,e^{i\varphi_2}. \quad (4)$$

Можна шукати розв'язки і для $N > 1$. Очевидно, що схема пошуку цих розв'язків аналогічна, просто вони будуть більш складними та об'ємними (але структуру матимуть таку ж).

Аналіз резонансних випадків. Якщо амплітуди станів $C_\pm$ відомі, то можна легко порахувати очікувані значення проекцій спінового моменту, визначені таким чином: $\mathrm{S}_i(t) = \langle\Psi(t)|\hat{\sigma}_i|\Psi(t)\rangle$. Вони відповідають вектору Блоха $\mathbf{S}(t)$, еволюція якого відбувається на сфері. Його третю компоненту $S_3(t)$, корисну для фізичної інтерпретації, можна знайти, знаючи амплітуди станів, користуючись виразом

$$S_3(t) = |\widetilde{C}_+(t)|^2 - |\widetilde{C}_-(t)|^2.$$

Задача динаміки дворівневої системи в полі Рабі $\mathbf{B}_R$, яке є наближенням до реального лінійно поляризованого гармонічного поля, коли амплітуда останнього є малою і частоти є близькими до резонансу (тобто наближення хвилі, що обертається, є застосовним), може бути легко розв'язана. Третя компонента вектора Блоха осцилює відповідно до такого виразу

$$S_3^{(R)}(t) = [\widetilde{\Delta}^2 + 4a^2\cos\Omega_R t]/\Omega_R^2,$$

де $\Omega_R = \sqrt{\widetilde{\Delta}^2 + 4a^2}$ є частотою Рабі і $\widetilde{\Delta} = \omega - \omega_0$ є детюнінгом між частотами обертового і постійного поля. Такі осциляції мають назву осциляцій Рабі.

Термін «*resonance*» ми будемо застосовувати до ситуації, коли за наявності спеціальних співвідношень між характерними частотами задачі система еволюціонує від стану $|+\rangle$ до стану $|-\rangle$, тобто випадку, коли $S_3(\tau = \tau_0)$ дорівнює -1. У полі Рабі $\mathbf{B}_R$ єдиною умовою резонансу є $\omega = \omega_0$, тоді система здійснює осциляції між станами з періодом $T_R = \pi/a$. Ситуацію, коли характерним періодом динаміки є T_R, ми будемо називати *резонансом Рабі*.

У *нелінійно модульованому полі Рабі* умови $\omega = \omega_0$ недостатньо для виконання $S_3(\tau_0) = -1$. Використовуючи явні вирази для амплітуд, ми отримуємо

$$S_3(\tau) = 2\mathrm{T}_N(-k\mathrm{sn}\tau)^2 - 1.$$

Тому $\mathrm{T}_N(-k_{res})^2 = 0$ є додатковою умовою резонансу. У випадку N*-солітонного імпульсу* ($k = 1$) єдиною умовою резонансу є $\nu = \omega_0$. Динаміку вектора Блоха подано на рис. 1. Можна побачити, що лише при $k = 1$ відбувається резонанс.

Висновок

Послуговуючись результатами, здобутими в ході виконання цієї роботи, отримано, що задача динаміки спіна в магнітному полі може розглядатись як задача керування — задача, в якій необхідно перевести спін з одного стану в інший або в їх суперпозицію. Вибір магнітних полів можна сформулювати як окрему математичну задачу, де потрібно обирати такі поля, щоб задача роз'язувалася точно в термінах відомих функцій. У цій роботі розглядається нелінійно модульоване поле Рабі і показано, що у двох граничних випадках нелінійно модульованого поля Рабі задача знаходження амплітуд станів розв'язується точно, причому обидва розв'язки є поліномами першого степеня. Відповідно, побудувавши схему для знаходження загального розв'язку, показано, що рівняння Шредінґера для спіна 1/2, що перебуває в магнітному полі виду $\vec{B} = \big(Nk\nu\mathrm{cn}(\nu t|k)\cos\omega t, Nk\nu\mathrm{cn}(\nu t|k)\sin\omega t, \omega_0\big)$, розв'язується точно і умови резонансу в такому полі узагальнюють умови резонансу поля Рабі.

Подяка

Ця стаття є підсумком бакалаврської роботи автора і базується на детальному опрацюванні статті [6]. Автор висловлює подяку Безвершенко Ю. В. за зауваження і консультації під час роботи над задачею.

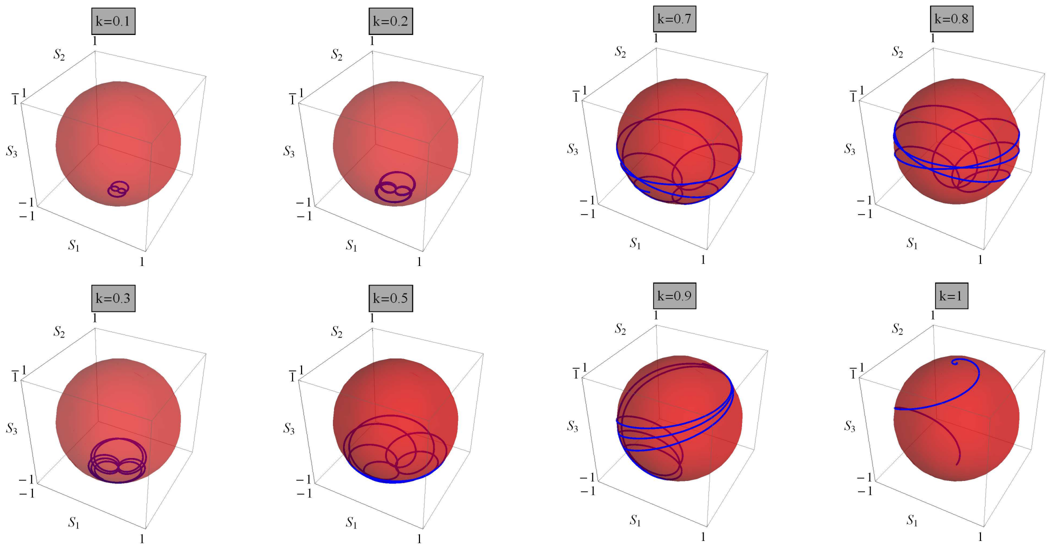

Рис. 1. Динаміка вектора Блоха спіна 1/2 під дією кноїдального поля залежно від значення параметра k

Список літератури

1. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса / Ч. Сликтер. — М. : Мир, 1981. — 448 с.
2. Бауместер Д. Физика квантовой информации / Д. Бауместер, А. Экерт, А. Цайлингер. — М. : Постмаркет, 2002. — 376 с.
3. Gutinger R. Das Verhalten von Atomen im magnetischen Drehfeld / R. Gutinger // Zeits. f. Physik. — 1931. — Bd. 73. — S. 169–184.
4. Majorana E. Atomi orientati in campo magnetico variabile / E. Majorana // Nuovo Cimento. — 1932. — Vol. 9. — P. 43–50.
5. Rabi I. I. Space quantization in a gyrating magnetic field / I. I. Rabi // Phys. Rev. — 1937. — Vol. 51, no. 8. — P. 652–654.
6. Bezvershenko Yu. V. Resonance in a driven two-level system: analytical results without the rotating wave approximation / Yu. V. Bezvershenko, P. I. Holod // Phys. Lett. A. — 2011. — Vol. 375. — P. 3936–3940.
7. Уиттекер Э. Т. Курс современного анализа. Часть II / Э. Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон. — М. : Гл. ред. физ.-мат. лит., 1963. — 516 с.
8. Градштейн И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. — М. : Государственное изд. физ.-мат. литературы, 1963. — 1108 с.

O. Horopashnyi

SPIN DYNAMICS IN THE NONLINEAR WAVE FIELD

In this paper we consider problem of spin dynamics in a two-level system, which is important for the development of quantum informatics. As a time-dependent magnetic field of the two-level system was chosen field of nonlinear wave (nonlinearly modulated Rabi field). From a mathematical point of view to solve the Schrödinger equation in this field is impossible, so scheme was constructed to obtain analytical solutions and this scheme gives accurate solutions of Schrödinger equation. Also in the work analyzed the resonance condition in this field and they are generalizations of the resonance conditions in Rabi field.

Keywords: spin, magnetic resonance, two-level system.

Матеріал надійшов 16.02.2015