

Об эффекте стабилизации положения магнитного резонанса согласованным полем

Е.А. Иванченко, А.П. Толстолужский

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина
E-mail: yevgeny@kipt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 4 июля 2005 г.

В формализме матрицы плотности в двухуровневой системе исследована периодическая во времени модуляция магнитного поля, стабилизирующая положение магнитного резонанса. Найдено точное решение для матрицы плотности при резонансе. Показано, что при резонансе вероятность перехода с переворотом спина не зависит от формы поля, то есть основной резонанс стабилен относительно согласованного изменения продольного и поперечного магнитного поля. Получено дифференциальное уравнение для вероятности перехода. Численно исследована зависимость усредненной по времени вероятности переворота спина от нормированной ларморовой частоты при различных параметрах модели с учетом диссипации и декогерентности. Показано, что ширина резонансных линий существенно увеличивается с увеличением диссипации и декогерентности. Положение основного резонанса не зависит от деформации поля и диссипации, изменяется только ширина резонанса. Изучены нечетные параметрические (многофотонные) резонансные переходы. Рассмотрена статическая намагниченность, индуцированная согласованным полем. Проведенное исследование может найти применение при анализе интерференционных экспериментов, совершенствовании конструкций магнитных спектрометров, манипуляции q -битами.

В формалізмі матриці густини в дворівневій системі досліджено періодичну в часі модуляцію магнітного поля, яка стабілізує положення магнітного резонансу. Знайдено точний розв'язок для матриці густини при резонансі. Показано, що при резонансі ймовірність переходу з переворотом спіну не залежить від форми поля, тобто основний резонанс стабільний відносно узгодженої зміни поздовжнього і поперечного магнітного поля. Одержано диференціальне рівняння для ймовірності переходу. Чисельно досліджено залежність усередненої по часу ймовірності перевороту спіну від нормованої ларморовської частоти при різних параметрах моделі з урахуванням дисипації та декогерентності. Показано, що положення основного резонансу не залежить від деформації поля і дисипації, а змінюється тільки ширина резонансу. Досліджено непарні параметричні (багатофотонні) резонансні переходи. Розглянуто статичну намагніченість, індуковану узгодженим полем. Виконане дослідження може бути корисним для аналізу інтерференційних експериментів, удосконалення конструкцій магнітних спектрометрів, керування q -бітами.

PACS: **33.35.+r**, **76.30.-k**, 02.30.Nq, 85.35.Gv

Ключевые слова: Спиновый резонанс, параметрический резонанс, осцилляции Раби, декогерентность

1. Введение

В стандартной реализации магнитного резонанса постоянное магнитное поле перпендикулярно линейно поляризованному переменному во времени t монохроматическому магнитному полю. При этом происходит

сдвиг резонансной частоты (Блоха–Зигерта сдвиг [1]). Цель работы состоит в предложении и исследовании такой конфигурации магнитного поля, при которой положение главного резонанса определяется только ларморовой частотой при произвольных пара-

метрах системы. Эта цель может быть достигнута путем обобщения модели Раби [2]. Раби изучил временную динамику частицы с дипольным магнитным моментом и спином $1/2$ в постоянном магнитном поле H_0 , направленном по оси z , и перпендикулярным к нему равномерно вращающимся с частотой $\omega/2\pi$ переменным магнитным полем $H_x = h_0 \cos \omega t$, $H_y = h_0 \sin \omega t$, H_0, h_0 — амплитуды поля.

Существует ряд способов модуляции магнитного поля при изучении магнитного резонанса в зависимости от цели исследования (см. работы [3] и ссылки в них). В работах [4,5] без учета диссипации исследована временная эволюция частицы с дипольным магнитным моментом и спином половина в деформированном магнитном поле вида

$$\mathbf{H}(t) = (h_0 \operatorname{cn}(\omega t, k), h_0 \operatorname{sn}(\omega t, k), H_0 \operatorname{dn}(\omega t, k)), \quad (1)$$

в котором $\operatorname{cn}, \operatorname{sn}, \operatorname{dn}$ — эллиптические функции Якоби [6]. Такая модуляция поля при изменении модуля эллиптических функций от нуля до единицы описывает класс форм поля от тригонометрических ($\operatorname{cn}(\omega t, 0) = \cos \omega t$, $\operatorname{sn}(\omega t, 0) = \sin \omega t$, $\operatorname{dn}(\omega t, 0) = 1$) [2] до импульсных экспоненциальных ($\operatorname{cn}(\omega t, 1) = 1/\operatorname{ch}(\omega t)$, $\operatorname{sn}(\omega t, 1) = \operatorname{th}(\omega t)$, $\operatorname{dn}(\omega t, 1) = 1/\operatorname{ch}(\omega t)$) [7]. Эллиптические функции $\operatorname{cn}(\omega t, k)$, $\operatorname{sn}(\omega t, k)$ имеют вещественный период $4K/\omega$, в то время как у функции $\operatorname{dn}(\omega t, k)$ вещественный период в два раза меньший. Здесь K — полный эллиптический интеграл первого рода [6]. Другими словами, хотя поле является периодическим с общим вещественным периодом $4K/\omega$, но, как видно, частота амплитудной модуляции продольного поля в два раза больше частоты амплитудной модуляции поперечного поля. Такое поле названо согласованным. В работе [5] был предсказан эффект стабилизации положения магнитного резонанса в согласованном поле. В настоящей работе исследовано влияние диссипации и декогерентности на стабилизацию.

2. Модель

Динамику частицы со спином $1/2$ и магнитным моментом в переменном магнитном поле $\mathbf{H}(t)$ будем описывать в формализме матрицы плотности ρ с учетом диссипативного окружения с помощью уравнения Лиувилля–Неймана–Линдблада [8–10]:

$$i\partial_\tau \rho = [\hat{H}, \rho]_- - \frac{i}{2\hbar\omega} \sum_{i=1}^3 (L_i^\dagger L_i \rho + \rho L_i^\dagger L_i - 2L_i^\dagger \rho L_i) \quad (2)$$

с эрмитовым гамильтонианом

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{\omega_0}{2\omega} \operatorname{dn}(\tau, k) & \frac{\omega_1}{2\omega} (\operatorname{cn}(\tau, k) - i \operatorname{sn}(\tau, k)) \\ \frac{\omega_1}{2\omega} (\operatorname{cn}(\tau, k) + i \operatorname{sn}(\tau, k)) & -\frac{\omega_0}{2\omega} \operatorname{dn}(\tau, k) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

в котором безразмерная независимая переменная $\tau = \omega t$, $\omega_0 = g\mu_0 H_0/\hbar$ — частота Лармора, $\omega_1 = g\mu_0 h_0/\hbar$ — амплитуда поперечного поля в единицах угловой частоты, g — фактор Ланде, μ_0 — магнетон Бора. Операторы L_i выберем в виде $L_i = \sqrt{\Gamma_i/2} \sigma_i$ [11], в которых Γ_i — феноменологические константы, учитывающие декогерентность и диссипацию в системе, а матрицы Паули равны

$$\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right).$$

Будем считать, что в начальный момент матрица плотности равна

$$\rho(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Выполним замену $\rho = \alpha^{-1} r \alpha$ с матрицей $\alpha = \begin{pmatrix} f & 0 \\ 0 & f^* \end{pmatrix}$, где функция f имеет вид

$$f = \sqrt{\operatorname{cn} \tau - i \operatorname{sn} \tau} = \sqrt{\frac{1 + \operatorname{cn} \tau}{2}} - i \operatorname{sgn}(\operatorname{sn} \tau) \sqrt{\frac{1 - \operatorname{cn} \tau}{2}}. \quad (5)$$

Уравнение для преобразованной матрицы r принимает форму

$$i\partial_\tau r = \frac{\omega_1}{2\omega} [\sigma_x, r]_- + \frac{\delta_r}{2\omega} \operatorname{dn} \tau [\sigma_z, r] - \frac{i}{2\hbar\omega} \sum_{i=1}^3 (\alpha L_i^\dagger L_i \alpha^{-1} r + r \alpha L_i^\dagger L_i \alpha^{-1} - 2\alpha L_i \alpha^{-1} r \alpha L_i^\dagger \alpha^{-1}), \quad (6)$$

в котором расстройка δ_r равна

$$\delta_r = \omega_0 - \omega. \quad (7)$$

Поскольку расстройка входит в уравнение (6) в явном виде, положение главного резонанса не претерпевает сдвига при изменениях параметров модели. При остром резонансе, когда $\omega_0 = \omega$, без учета затухания вероятность перехода

$$P_{\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}}(\tau, \delta_r = 0) = \sin^2 \frac{\omega_1}{2\omega} \tau \quad (8)$$

не содержит модуля k , т.е. не зависит от согласованной деформации поля [4,5].

3. Дифференциальные уравнения для определения вероятности перехода с учетом релаксации

В общем случае при произвольной расстройке δ_r (7) представим матрицу r в виде разложения по полному набору матриц Паули:

$$r = \frac{1}{2}(1 + \sigma \mathbf{R}), \quad r = r^+, \quad \text{Spr} = 1 \quad (9)$$

для всех τ . Подставим выражение для r (9) в уравнение (6). В результате получим систему трех дифференциальных уравнений первого порядка с периодическими коэффициентами относительно искомых вещественных функций R_x, R_y, R_z :

$$\begin{aligned} \partial_\tau R_x = & -\frac{\delta_r}{\omega} \text{dn} \tau R_y - \\ & -\frac{\Gamma_x}{\hbar\omega} (\text{sn}^2(\tau, k) R_x - \text{cn}(\tau, k) \text{sn}(\tau, k) R_y) - \\ & -\frac{\Gamma_y}{\hbar\omega} (\text{cn}^2(\tau, k) R_x + \text{cn}(\tau, k) \text{sn}(\tau, k) R_y) - \frac{\Gamma_z}{\hbar\omega} R_x, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \partial_\tau R_y = & \frac{\delta_r}{\omega} \text{dn} \tau R_x - \frac{\omega_1}{\omega} R_z + \\ & + \frac{\Gamma_x}{\hbar\omega} (\text{cn}(\tau, k) \text{sn}(\tau, k) R_x - \text{cn}^2(\tau, k) R_y) - \\ & -\frac{\Gamma_y}{\hbar\omega} (\text{cn}(\tau, k) \text{sn}(\tau, k) R_x + \text{sn}^2(\tau, k) R_y) - \frac{\Gamma_z}{\hbar\omega} R_y, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\partial_\tau R_z = \frac{\omega_1}{\omega} R_y - \left(\frac{\Gamma_x}{\hbar\omega} + \frac{\Gamma_y}{\hbar\omega} \right) R_z \quad (12)$$

с начальными условиями $R_x(0) = R_y(0) = 0$, $R_z(0) = 1$. Теперь в терминах R_x, R_y, R_z матрица плотности ρ принимает вид

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + R_z & f^2(R_x - iR_y) \\ f^{*2}(R_x + iR_y) & 1 - R_z \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Вероятность перехода с переворотом спина равна матричному элементу ρ_{22} , то есть

$$P_{\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}}(\tau, \delta_r, k) = \frac{1}{2}(1 - R_z). \quad (14)$$

Используя выражение (14) и систему уравнений (10)–(12), легко получить дифференциальное уравнение третьего порядка для вероятности перехода, которое мы здесь не выписываем. При выборе констант распада $\Gamma_x = \Gamma_y = \Gamma_z = \Gamma$ система (10)–(12) принимает вид

$$\partial_\tau R_x = -\frac{\delta_r}{\omega} \text{dn} \tau R_y - \gamma R_x, \quad (15)$$

$$\partial_\tau R_y = \frac{\delta_r}{\omega} \text{dn} \tau R_x - \frac{\omega_1}{\omega} R_z - \gamma R_y, \quad (16)$$

$$\partial_\tau R_z = \frac{\omega_1}{\omega} R_y - \gamma R_z, \quad (17)$$

которая при резонансе $\delta_r = 0$ становится системой с постоянными коэффициентами

$$\partial_\tau R_x = -\gamma R_x, \quad (18)$$

$$\partial_\tau R_y = -\beta R_z - \gamma R_y, \quad (19)$$

$$\partial_\tau R_z = \beta R_y - \gamma R_z, \quad (20)$$

где $\gamma = 2\Gamma/\hbar\omega$, $\beta = \omega_1/\omega$. Аналитическое решение системы (18)–(20) с учетом начальных условий имеет вид

$$R_x(\tau) = 0, \quad (21)$$

$$R_y(\tau) = -\exp(-\gamma\tau) \sin(\beta\tau), \quad (22)$$

$$R_z(\tau) = \exp(-\gamma\tau) \cos(\beta\tau). \quad (23)$$

В этом случае вероятность переворота спина равна

$$P_{\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}}(\tau, \delta_r = 0, k) = \frac{1}{2}(1 - \exp(-\gamma\tau) \cos(\beta\tau)). \quad (24)$$

Из системы (15)–(17) при модуле $k = 0$ получаем уравнения, описывающие модель Раби с затуханием в форме Линдблада

$$\partial_\tau R_x = \delta R_y - \gamma R_x, \quad (25)$$

$$\partial_\tau R_y = -\beta R_z + \delta R_x - \gamma R_y, \quad (26)$$

$$\partial_\tau R_z = \beta R_y - \gamma R_z, \quad (27)$$

где $\delta = \delta_r/\omega$.

Решение этой системы нетрудно получить в явном виде:

$$R_x(\tau) = \frac{\omega_1 \delta_1}{\Omega_R^2} \exp(-\gamma\tau) (1 - \cos \frac{\Omega_R}{\omega} \tau), \quad (28)$$

$$R_y(\tau) = -\frac{\omega_1}{\Omega_R} \exp(-\gamma\tau) \sin \frac{\Omega_R}{\omega} \tau, \quad (29)$$

$$R_z(\tau) = \frac{1}{\Omega_R^2} \exp(-\gamma\tau) (\delta_r^2 + \omega_1^2 \cos \frac{\Omega_R}{\omega} \tau), \quad (30)$$

где $\Omega_R = \sqrt{\delta_r^2 + \omega_1^2}$ — частота Раби.

4. Численные результаты

4.1. Усредненная по времени вероятность перехода

Усредненная по времени вероятность перехода с переворотом спина определяется выражением

$$\bar{P} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \frac{1 - R_z(\tau)}{2}. \quad (31)$$

Усредненная по времени вероятность перехода (24) равна $\frac{1}{2}$ как и без учета диссипативного окружения [5], т.е. учет диссипации и декогерентности не изменяет положение главного резонанса. Найдем зависимость вероятности \bar{P} от формы поля, изменяя модульный параметр k при разных значениях δ_r , численно решая систему (15)–(17).

На рис. 1 представлена зависимость усредненной вероятности \bar{P} (31) от нормированной ларморовой частоты ω_0/ω при $k=0$ при различных Γ . Видно, что с увеличением Γ увеличивается ширина резонансной линии. При точном резонансе значение вероятности перехода не зависит от деформации магнитного поля. На рис. 2 приведены усредненные вероятности перехода в согласованном поле при различных параметрах как

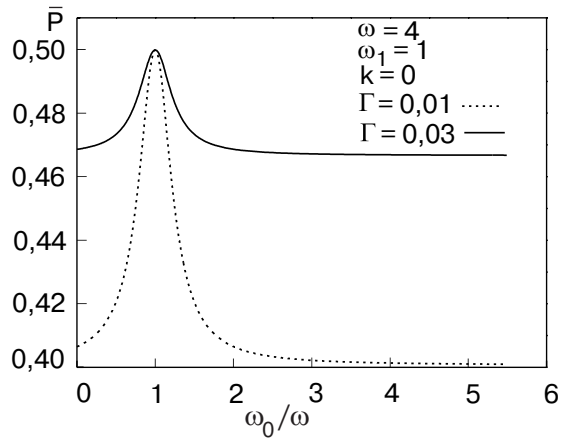


Рис. 1. Зависимость усредненной по времени вероятности перехода в модели Раби-Линдблада как функция нормированной ларморовой частоты и констант затухания.

функции нормированной ларморовой частоты с учетом диссипации и декогерентности. Как уже указывалось в работе [4], и численно показано в работе [5], параметрические резонансы (многофотонные резонансы по терминологии формализма Флоке [12]) возникают только при отличных от нуля расстройке δ_r и модуле k , поскольку расстройка и деформация в уравнение (6) входят в виде произведения. Когда один из параметров

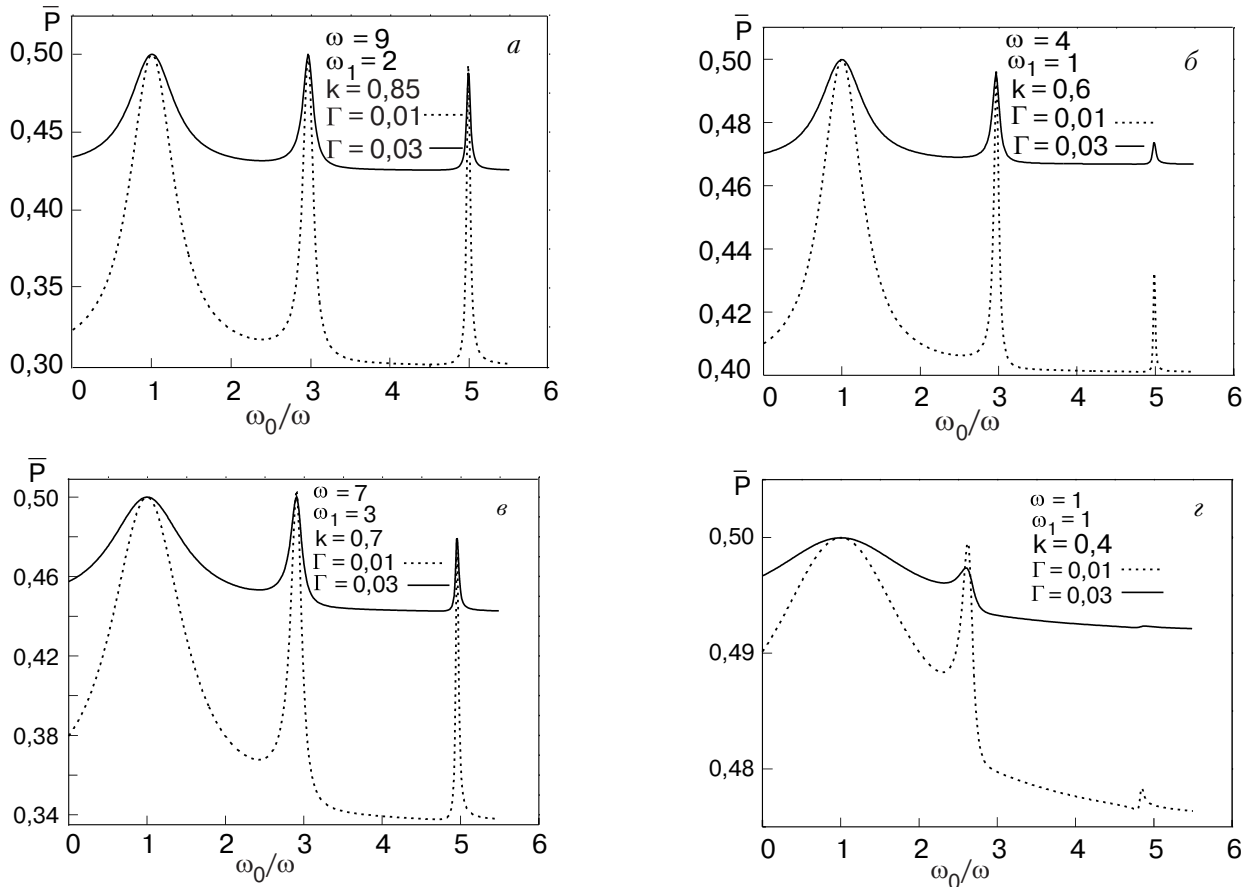


Рис. 2. Усредненная по времени вероятность перехода в согласованном поле при различных параметрах как функция нормированной ларморовой частоты и констант диссипации и декогерентности.

δ_r или k равен нулю, параметрические резонансы отсутствуют (см. рис. 1). Характерная особенность вероятности поглощения, представленной на рис. 1, 2, состоит в том, что ширина всех резонансных линий существенно увеличивается с увеличением диссипации и декогерентности (вызванной, например, температурой [13]) и с незначительным сдвигом положения параметрических резонансов. Положение резонансов определяется заданным начальным значением спина (4). Первый резонанс соответствует одному поглощенному резонансному фотону, второй определяется поглощением–испусканием–поглощением и так далее. Положение нечетных параметрических резонансов крайне близко к $\omega_0/\omega = 2p + 1$, где $p = 1, 2, \dots$, но имеет тенденцию заметного сдвига с увеличением отношения ω_1/ω (рис. 1, 2).

4.2. Генерация статического магнитного поля

Усредненные по времени компоненты вектора поляризации определяются формулами

$$n_x = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T d\tau (cR_x + sR_y), \quad (32)$$

$$n_y = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T d\tau (sR_x - cR_y), \quad (33)$$

$$n_z = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T d\tau R_z, \quad (34)$$

где $c = \text{cn}^2(\tau, k) - \text{sn}^2(\tau, k)$, $s = -2\text{sn}(\tau, k)\text{cn}(\tau, k)$.

Как видно на рис. 3, происходит генерация статического магнитного поля (при $\delta_r = 0$ в плоскости xOy), которая уменьшается с увеличением констант релаксации. Если модульный параметр стремится к нулю, то генерация исчезает. n_y -компонента статической поляризации имеет резкие всплески по амплитуде в окрестностях резонансов, но с увеличением параметра ω_0/ω уменьшается их амплитуда и ширина. Следует отметить, что возникновение нулевой гармоники вызвано только деформацией поля без учета диссипации, в то время как в работах [14] при другой модуляции магнитного поля этот же эффект исчезает в отсутствие диссипации.

Численные решения системы (15)–(17) выполнены методом Рунге–Кутты с шагом по $\tau = 0,01$ и с шагом по $\omega_0/\omega = 0,01$. Интервал усреднения T был выбран равным 500.

5. Заключение

В формализме матрицы плотности рассмотрено поведение частицы (q -бита) со спином $1/2$ и дипольным магнитным моментом в переменном магнитном поле вида $(h_0 \text{cn}(\omega t, k), h_0 \text{sn}(\omega t, k), H_0 \text{dn}(\omega t, k))$, в котором ω – частота, t – время, h_0 и H_0 – амплитуды поля, cn , sn , dn – эллиптические функции Якоби, k – модуль эллиптических функций. Изменение параметра k от нуля до единицы порождает широкий набор функций от тригонометрических форм до импульсных экспоненциальных, модулирующих поле. Найдено точное решение для матрицы плотности при резонансе для любого k . Показано, что в этом случае

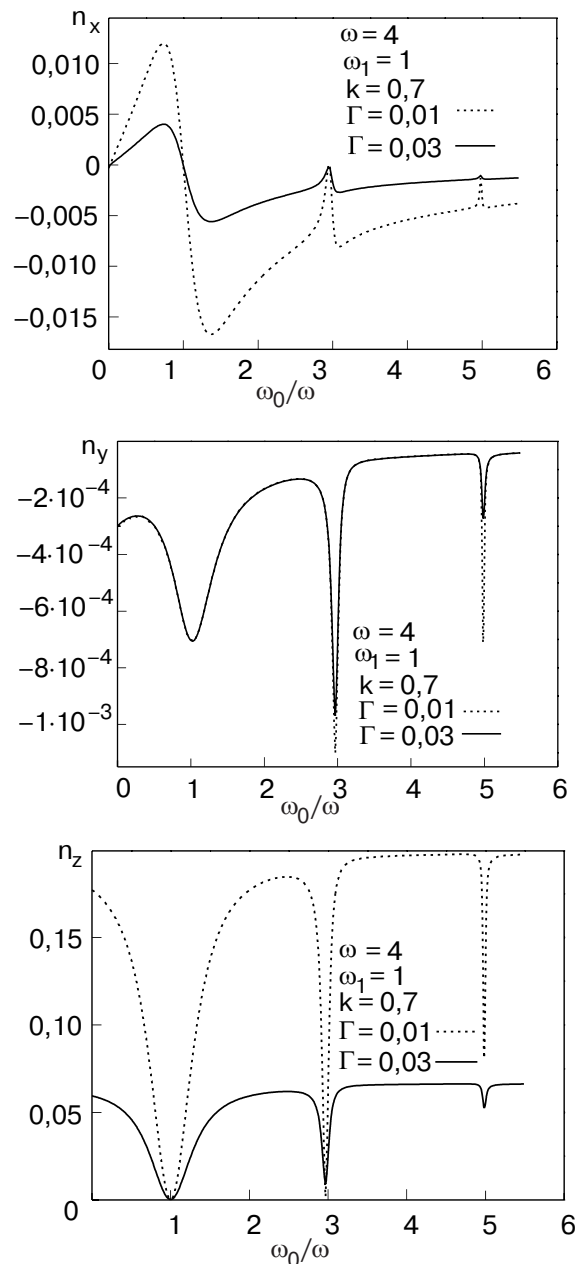


Рис. 3. Статическая поляризация n_x, n_y, n_z в согласованном поле как функция нормированной ларморовой частоты и констант диссипации и декогерентности.

вероятность переворота спина не зависит от k . Получены дифференциальные уравнения для вероятности перехода с учетом диссипации и декогерентности. Численно исследована зависимость усредненной по времени вероятности переворота спина от нормированной ларморовой частоты при различных характеристических параметрах модели. Показано, что положение основного резонанса не претерпевает сдвига при изменении параметров, а изменяется только ширина резонансной линии. Положение нечетных параметрических (многофотонных) резонансов имеет тенденцию заметного сдвига с увеличением амплитуды поперечного поля при заданной частоте. Деформация поля, диссипация и декогерентность приводят к уширению резонансных линий. Вычислена статическая поляризация, индуцированная согласованным полем.

Целесообразно выполнить эксперимент для проверки теоретических предсказаний относительно стабильности положения магнитного резонанса при различных параметрах модели. Очевидно, что такой эксперимент является расширением экспериментальной ситуации в циркулярно поляризованном поле. Поскольку параметрические резонансы в согласованном магнитном поле имеют заметную ширину, то, возможно, предпочтительно исследовать магнитный резонанс на параметрических частотах. Проведенное исследование может найти применение при анализе интерференционных экспериментов, совершенствовании конструкций магнитных спектрометров, манипуляции q -битами [15].

Авторы благодарны И.А. Громову за интерес к работе и полезные замечания.

1. M. Grifoni and P. Hänggi, *Phys. Rep.* **304**, 229 (1998).
2. I.I. Rabi, *Phys. Rev.* **51**, 652 (1937); J. Schwinger, *Phys. Rev.* **51**, 648 (1937).
3. M. Kälin, I. Gromov, and A. Schweiger, *J. Magn. Resonance* **160**, 166 (2003); M. Fedin, I. Gromov, and A. Schweiger, *J. Magn. Resonance* **171**, 80 (2004).
4. E.A. Ivanchenko, *Physica* **B358**, 308 (2005).
5. E.A. Иванченко, *ФНТ* **31**, 761 (2005).
6. M. Abramovitz and I.A. Stegun (eds.), *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1968).
7. N. Rosen and C. Zener, *Phys. Rev.* **40**, 502 (1932); A. Bambini and P.R. Berman, *Phys. Rev.* **A23**, 2496 (1981).
8. G. Lindblad, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
9. V. Gori, A. Kossakowski, and E.C.G. Sudarshan, *J. Math. Physics* **17**, 821 (1976).

10. M.O. Scully and M.S. Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press (1997).
11. A.R.P. Rau and R.A. Wendell, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 220405 (2002).
12. I. Gromov and A. Schweiger, *J. Magn. Resonance* **146**, 110 (2000); J.H. Shirley, *Phys. Rev.* **B138**, 979 (1965).
13. И.И. Кондиленко, П.А. Коротков, *Введение в атомную спектроскопию*, Вища школа, Киев (1976).
14. S. Flach and A.A. Ovchinnikov, *Physica* **A292**, 268 (2001); S. Flach, A.E. Miroshnichenko and A.A. Ovchinnikov, *Phys. Rev.* **B65**, 104438 (2002).
15. R.W. Simmons, K.M. Lang, D.A. Hite, S. Nam, D.P. Pappas, and J.M. Martinis, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 077003 (2004); K.B. Cooper, Mattias Syeffen, R.M. McDermott, R.W. Simmonds, Seongshik Oh, D.A. Hite, D.P. Pappas, and J.M. Martinis, ArXiv: cond-mat/0405710, (2004).

On effect of stability of magnetic resonance position by harmonized field

E.A. Ivanchenko and A.P. Tolstoluzhsky

The formalism of density matrix in a two-level system is used to study the time-periodic modulation of the magnetic field stabilizing the magnetic resonance position. An exact solution for density matrix at resonance is found. It is shown that the fundamental resonance is stable with respect to consistent variations of longitudinal and transversal magnetic fields. A differential equation for the transition probability is obtained. The dependence of time-averaged spin flip probability on the normalized Larmor frequency was numerically researched in different parameter regimes with account of dissipation and decoherence. It is shown that the position of the main resonance is independent of field deformation and dissipation; only the width of resonance line changes upon field deformation and dissipation. The odd parametric (multi-photon) resonance transitions is studied. Static magnetization induced by time-periodic modulated magnetic field is considered. The results of the investigation may be useful for analysis of interference experiments, improvement of magnetic spectrometers and in the field of quantum computing manipulation of q -bits.

Keywords: Spin resonance, parametric resonance, Rabi oscillations, decoherence