

УДК

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ ЯМР ^{31}P В БЕССПИНОВОЙ МАТРИЦЕ ^{28}Si И ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА

А. И. Головашкин, С. Н. Добряков, В. В. Привезенцев¹, А. М. Цховребов

В контексте того, что систему ядерных спинов ^{31}P предполагается использовать для организации рабочих регистров твердотельного квантового компьютера, решается задача численного моделирования спектров ЯМР донорной примеси в кремнии. Показана применимость используемого метода моделирования при количественном наращивании ЯМР регистра, а также при его топологическом усложнении. Предложена схема считывания результатов “квантового счета” на уровне, позволяющем с помощью SQUID’а определить состояние отдельного спина.

На начальной стадии создания квантового компьютера большое внимание уделяется разработке математических моделей систем, способных обеспечить физическую реализацию такого компьютера [1 – 3]. В настоящей работе рассматривается математическая модель двухспинового ЯМР регистра, представляющего собой систему из двух ядерных спинов, находящихся в индивидуальных локальных магнитных полях. Предложенная модель допускает неограниченное расширение количества спинов в магнитных полях специальной конфигурации. Что касается конфигурации самого квантового регистра, то в простейшем варианте – это цепочка ядерных спинов, связанных друг с другом. Связь между цепочками регистров сможет осуществляться с помощью квантовых точек (квантовых затворов).

¹Физико-технологический институт РАН.

Конкретный вид спектров ядерно-магнитного резонанса (ЯМР) фосфора ^{31}P , находящегося в матрице кремния, полученный в рамках рассматриваемой модели, может быть использован для сравнения с данными диагностических измерений ЭПР (электронно-парамагнитного резонанса) кремниевых образцов, предназначенных для изготовления прототипа твердотельного квантового компьютера.

Моделирование спектров ЯМР. При составлении программы вычислений спектров ЯМР для простоты были исключены все анизотропные взаимодействия и оставлен только гейзенберговский обмен между спинами, включая ядерно-ядерный и электронно-ядерный. Это же относится и к процессу релаксационного обмена, который присутствует в виде парного обмена, но при этом опущены члены, отвечающие спиновому обмену с окружающей средой, что вполне допустимо в случае матрицы кремния. Все расчеты проводились на основе схемы, предложенной ранее в [4].

Отмеченные выше взаимодействия описываются в приближении точечных диполей в молекулярной системе координат спин-гамильтонианом [5]:

$$\hat{H} = -\hbar\gamma_1 B I_{1z} - \hbar\gamma_2 B I_{2z} + J_{12}(\vec{I}_1 \cdot \vec{I}_2) + a_1 I_{1z} S_{1z} + a_2 I_{2z} S_{2z}, \quad (1)$$

где \mathbf{B} – вектор индукции общего магнитного поля, зависящий от ориентации в молекулярной системе координат. Введение в гамильтониан разных гиромагнитных отношений $\gamma_1 \neq \gamma_2$ для соседних ядер фосфора позволяет таким образом учесть, что каждый ядерный спин на самом деле находится здесь в своем локальном поле $B \pm (1/2) \cdot \Delta B = (\gamma_{1,2}/\gamma) \cdot B$, где $\gamma = \mu_N/(I\hbar)$ – обычное гиромагнитное отношение для ядер фосфора, μ_N – ядерный магнетон Бора. Все расчеты проводились в лабораторной системе координат, которая связана с молекулярной системой координат через углы Эйлера. Ось z в лабораторной системе координат выбрана вдоль направления постоянного магнитного поля \mathbf{B}_0 , а ось x – вдоль переменного магнитного поля \mathbf{B}_1 , которое гораздо меньше постоянного. Здесь I_{1z} и I_{2z} – суть z -проекции первого \mathbf{I}_1 и второго \mathbf{I}_2 спинов ядер атомов фосфора на направление лабораторной оси z ; J_{12} – константа скалярного обмена (обменный интеграл) между двумя ядерными спинами; a_1 и a_2 – константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ) первого электрона с первым ядром фосфора и второго электрона со вторым ядром фосфора. В уравнении (1) первое и второе слагаемые отражают зеемановское взаимодействие ядерных спинов с магнитным полем; далее идет слагаемое, описывающее скалярное обменное взаимодействие; а затем два слагаемых, отвечающих за электрон-ядерное взаимодействия в предположении, что константы СТВ

гораздо меньше зеемановского поля: $a_1, a_2 \ll \mu B$.

Для расчета спектров ЯМР необходимо использовать квантовое уравнение Лиувилля, дополненное релаксационным членом (четырёхиндексной релаксационной матрицей). Введение этого оператора релаксации позволяет обобщить это уравнение на неравновесные процессы. В операторной записи уравнение Лиувилля запишется в виде [6]:

$$\dot{M} = i[H, M] + RM, \quad (2)$$

где M – магнитный момент перехода, H – спин-гамильтониан, R – оператор релаксации.

Расчет спектра осуществлялся путем решения (2) для M_x -компоненты магнитного перехода:

$$\dot{M}_x = i(HM_x - M_xH) + RM_x. \quad (3)$$

Здесь RM_x – релаксационный член, обусловленный взаимодействием спиновой системы с окружающей средой и ответственный за конечную ширину линий поглощения. Это уравнение решается в матричной форме в зеемановском представлении. Для двухспиновой системы при расчете спектров ЯМР выбранный базис – это четыре спиновых функции, в качестве которых целесообразно выбрать зеемановские ψ -функции:

$$\psi_n, \psi_m = \alpha_N \alpha_N, \alpha_N \beta_N, \beta_N \alpha_N, \beta_N \beta_N, \quad \text{где } m, n = 1; 2; 3; 4, \quad (4)$$

которые являются простыми произведениями спиновых функций (α_N, β_N) невозмущенного зеемановского гамильтониана [6]:

$$\hat{H} = \omega_1 I_{z1} + \omega_2 I_{z2}, \quad (5)$$

причем $\omega_{1,2} = \gamma_{N1,2} B$. Когда спин ядра атома фосфора направлен по полю, то это состояние α_N , а когда против поля – состояние β_N .

В явной форме уравнение (3) запишется в виде:

$$\dot{M}_{mn} = \sum_k i H_{mk} M_{kn} - i M_{mk} H_{kn} + \sum_{j,k} (\nu_{mj} p_{kn} + p_{mj} \nu_{kn}) (M_{jk} - M_{mn}) - R_{mn}^0 M_{mn}, \quad (6)$$

где M_{mn} – искомый матричный элемент x -составляющей оператора перехода из состояния m в состояние n в зависимости от времени; H_{mn} – матричные элементы спин-гамильтониана, а $R_{mjkn} = \nu_{mj} p_{kn} + p_{mj} \nu_{kn}$ – элементы полуэмпирического оператора релаксации [5].

В настоящей работе для выявления существа картины мы ограничились только изотропными взаимодействиями. В случае необходимости учета анизотропных взаимодействий (векторного и диполь-дипольного) необходимо при стандартной процедуре дополнить спин-гамильтониан недостающими членами. При этом нужно определенным образом организовать молекулярную систему координат и, поскольку все спектры ЯМР экспериментально записываются в лабораторной системе координат, необходимо осуществить переход от молекулярной системы координат к лабораторной с помощью углов Эйлера. В этом случае расчет спектров ЯМР должен проводиться по формуле

$$F(\omega) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} A(\omega, \theta, \varphi, \chi) \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot d\chi, \quad (7)$$

где $A(\omega, \theta, \varphi, \chi)$ – спектр ЯМР двухатомной фосфорной системы в молекулярной системе координат для ориентации диполя под углами Эйлера θ, φ, χ относительно внешнего магнитного поля.

Результаты численного эксперимента. Для реализации поставленной цели были использованы программы для моделирования спектров ЯМР двухспиновых систем [5]. Непосредственное измерение положений линий в спектрах ЯМР и расстояния между ними производится в Гс, исходя из соотношения $B(\Gamma c) = [h/(\mu_N \cdot g_N)] \cdot \nu(\Gamma c) = (\omega/\gamma)\nu(\Gamma c)$. Исходным базовым параметром была выбрана константа СТВ для фосфора в кремнии $a = 42 \Gamma c$ [7]. Другие константы были взяты из тех соображений, что они соизмеримы с базовой константой.

На рис. 1а-д показано изменение модельных спектров ЯМР фосфор-фосфорной двухспиновой системы в матрице бесспинового изотопа кремния ^{28}Si в зависимости от изменения скалярной константы обмена J (обменного интеграла) между атомами фосфора, причем $J = 0, 10, 40, 200$ и $500 \Gamma c$. Отметим, что каждый из спинов находится в своем локальном магнитном поле: 1-ый в поле с индукцией $-B_0 - (1/2) \cdot \Delta B$, а 2-ой спин в поле $-B_0 + (1/2) \cdot \Delta B$, где $B_0 = 540 \Gamma c$ – среднее значение магнитного поля, а ΔB – разность магнитных полей между соседними спинами. Рассматривался процесс, описываемый обменным интегралом в межатомном переносе спина между атомами фосфора через ряд бесспиновых атомов изотопа кремния ^{28}Si .

Из рис. 1а-д видно, что с увеличением обменного взаимодействия происходит существенное изменение спектров ЯМР рассмотренной фосфор-фосфорной двухспиновой системы. При $J = 0$ на спектре наблюдается дублет. С ростом J на спектре ЯМР

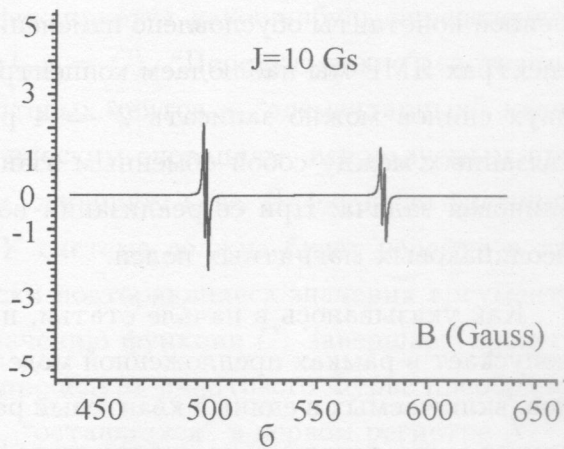
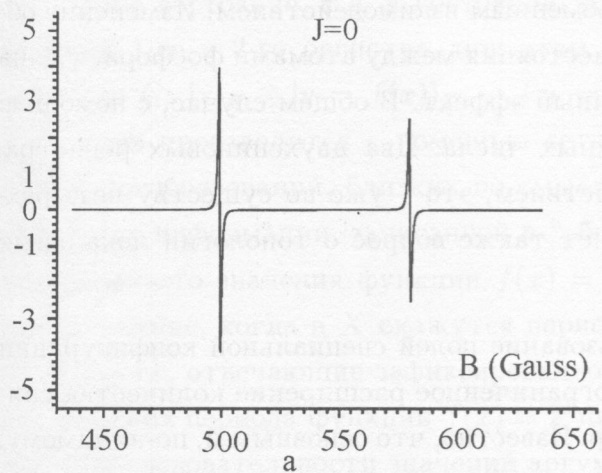
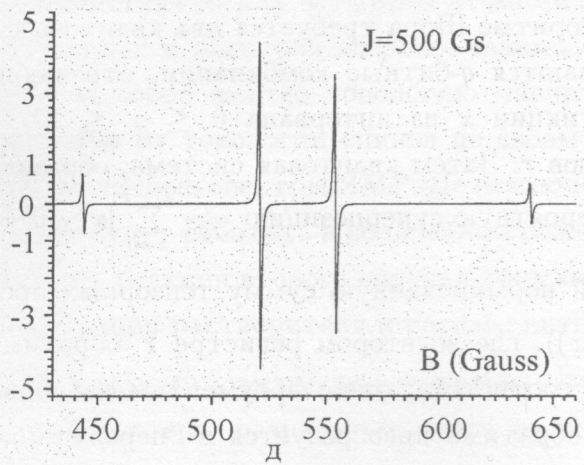
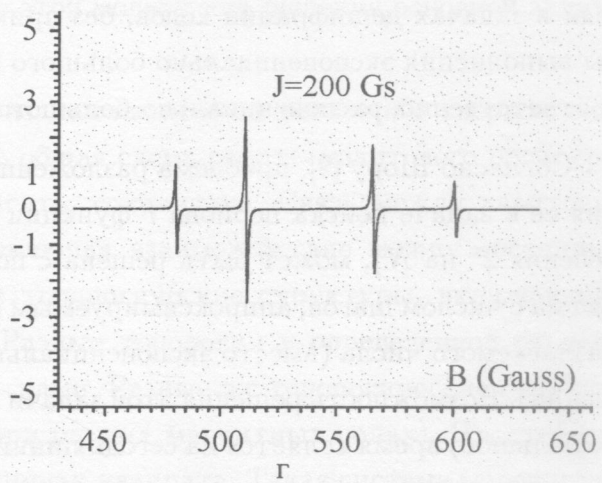
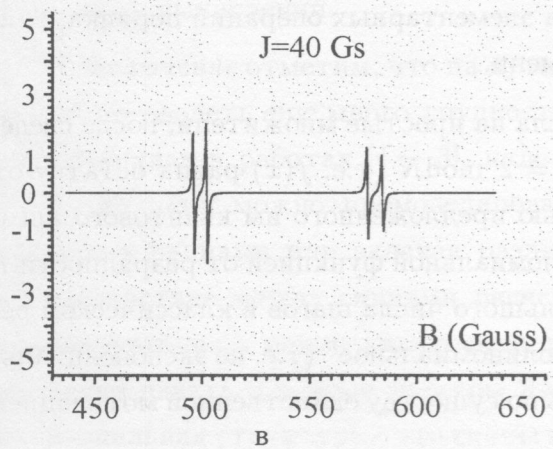


Рис. 1.



появляются сателлитные линии, вызванные обменным взаимодействием. Изменение обменной константы обусловлено изменением расстояния между атомами фосфора, т.е. на спектрах ЯМР мы наблюдаем концентрационный эффект. В общем случае, с помощью двух спинов можно записать $2^2 = 4$ различных числа. Два двухспиновых регистра, связанных между собой обменным взаимодействием, это – уже по существу четырех-спиновая задача. При ее реализации возникнет также вопрос о топологии локальных неодинаковых магнитных полей.

Как указывалось в начале статьи, использование полей специальной конфигурации допускает в рамках предложенной модели неограниченное расширение количества спинов, включаемых в единый квантовый регистр. Известно, что основным и, по-видимому, единственно детально разработанным к настоящему времени алгоритмом квантовых вычислений [8] является алгоритм факторизации Шора [9]. Аналогичный алгоритм разложения целого L -разрядного числа на простые сомножители $N = P \times Q \times \dots$, актуальный в задачах дешифрации кодов, без применения квантового компьютера потребовал бы выполнения экспоненциально большого числа элементарных операций порядка e^L и, соответственно, экспоненциально большого времени.

Согласно Шору [9], проблема разложения числа на простые множители, после сведения ее к задаче поиска периода r функции $f(x) = 2^x \bmod N$ (т.е. $f(x)$ равна остатку от деления 2^x на N), может быть решена с помощью предложенного им квантового алгоритма с числом шагов, аппроксимируемым полиномиальной функцией от разрядности L разлагаемого числа (вместо экспоненциально большого числа шагов в классическом решении). Возможность решения этой задачи за “полиномиальное” (т.е. не экспоненциально большое) время является на сегодняшний день по существу единственной мотивацией создания квантового компьютера.

Для определения периода функции в алгоритме Шора требуется два квантовых регистра X и Y . В первый (X) устанавливаются q -битные комбинации, отвечающие всем возможным значениям аргумента функции x из интервала $0 \leq x \leq 2^n - 1$, включающего несколько возможных периодов r . Затем квантовая система, образованная парой регистров, переводится в равновероятную суперпозицию $\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle_X |0\rangle_Y \xrightarrow{U_f}$ $\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle_X |f(x)\rangle_Y$, представляющую собой нормированную сумму тензорных произведений базисных состояний $|x\rangle$ и $|y = f(x)\rangle$, где во втором регистре Y обратимым образом записываются значения функции, соответствующие аргументам из первого регистра X . Теперь состояние этой пары обратимо преобразуется в “перепутанное”

квантовое состояние, т.е. в состояние, уже не сводимое к прямому произведению состояний 1-го и 2-го регистра, при этом в Y фиксируется какое-нибудь определенное значение C : $|x\rangle_X \otimes |y = f(x)\rangle_Y \leftrightarrow |x_k = s + rk, y = C\rangle$. “Перепутывание” состояния регистров производится с помощью сети квантовых гейтов – “элементарных” квантовых преобразований, близких по смыслу логическим операциям, используемым при обработке информации, записанной в “обычном” двоичном коде. Далее после фиксации определенного значения функции $f(x) = C$ в Y система должна будет перейти в такое состояние, когда в X окажутся периодически повторяющиеся значения аргумента $x_k = s + rk$, отвечающие зафиксированному значению функции C . Завершает процесс определения периода функции $f(x) = 2^x \bmod N$ процедура квантового Фурье преобразования последовательности значений аргумента, “оставшихся” в первом регистре X .

Таким образом допустимость в рамках предложенной модели неограниченного расширения количества спинов, включаемых в единый регистр, позволяет использовать квантовые регистры, построенные на основе этой модели для решения основной задачи квантовых вычислений.

В заключение отметим, что на пути реализации квантового регистра в твердом теле нужно преодолеть еще много трудностей, но общая схема работы квантового регистра, предложенная в работах [1 – 3], надо полагать, сохранится. Связь между квантовыми регистрами можно промоделировать, включая взаимодействие между соседними ядерными спинами или задавая различные топологические структуры, включающие взаимодействие между спинами регистра. Разные топологии в определенной степени моделируют связь между квантовыми регистрами. Разные же топологические структуры будут давать и разные спектры ЯМР (при разных магнитных полях). Простейшая нетривиальная структура – это спины в вершинах квадрата. Такая система моделирует взаимодействия между четырьмя атомами фосфора при учете спин-спиновых электрон-электронных и электрон-ядерных взаимодействий. Топология спинов не обязательно влечет за собой жестко топологию магнитного поля. Оно может быть организовано независимо от топологии спинов по своим собственным законам. Все это повлечет за собой различные спектры ЯМР. Не исключено, что основные элементы квантового компьютера будут работать в нелинейном режиме (включать в себя нелинейные процессы), например, реакции второго порядка типа концентрационных эффектов при соизмеримой концентрации растворителя и парамагнитных центров.

По-видимому, самым незавершенным местом “самой продвинутой” схемы квантового компьютера, разрабатываемого на основе спиновых твердотельных систем [1 –

3], остается проблема съема собственно результатов работы квантовых алгоритмов. В качестве варианта решения этой проблемы рассмотрим схему эксперимента, позволяющего в принципе регистрировать изменения состояния отдельного спина. Как показано ниже, работоспособность предлагаемой схемы основана, с одной стороны, на высокой чувствительности современных сверхпроводящих квантовых интерферометров (SQUID'ов), а с другой стороны, на эффекте усиления магнитного отклика, возникающего в системе сообщающихся парамагнитных подсистем, одна из которых асимптотически упорядочена, а другая асимптотически разупорядочена.

Рассчитаем изменение энтропии ΔS при перевертывании одного спина, если до этого момента система из N спинов была полностью поляризована. Достигнуть состояния практически полной поляризации можно в результате известного в физике низких температур метода адиабатического размагничивания [10]. Для этого на старте размагничивания система из N спинов вводится в насыщение магнитным полем достаточной величины и затем адиабатически изолируется (например, откачивается теплообменный газ), а поле при этом выводится в ноль. После такого размагничивания система спинов остается поляризованной даже в отсутствие внешнего поля [11]. В регистрах квантового компьютера такое состояние является аналогом состояния, устанавливаемого на обычном компьютере командой RESET.

Очевидно, что в отсутствие поля состояния “спин вверх” / “спин вниз” равновероятны, т.е. $P_{\uparrow} = P_{\downarrow} = 1/2$. При этом вероятность $W_N(m)$ того, что m спинов из общего числа N направлены вверх, а остальные $N - m$ соответственно “смотрят” вниз, описывается известной схемой независимых испытаний Бернулли [12] $W_N(m) = C_N^m P_{\uparrow}^m P_{\downarrow}^{N-m} = \frac{N!}{m!(N-m)!}$. Статистическое определение энтропии, восходящее к H -теореме Больцмана, задается выражением: $S = k(\ln W)$, где k – постоянная Больцмана. Тогда $\Delta S_{N \rightarrow N-1} = k \ln W(m = N-1) - k \ln W(m = N) = k \ln \frac{W_N(m=N-1)}{W_N(m=N)} = k \ln \frac{C_N^{N-1}}{C_N^N} = k \ln N$. Таким образом в условиях, близких к полному упорядочению спиновой системы, уменьшению магнитного момента на один магнетон Бора отвечает рост энтропии на $\Delta S_{N \rightarrow N-1} = k \ln N$. Далее оценим аналогичное изменение энтропии при повороте одного спина в условиях, близких к полному разупорядочиванию спиновой системы, когда примерно половина спинов “смотрит” вверх, а другая половина вниз $m \approx N/2$. Тогда $\Delta S_{N/2+1 \rightarrow N/2} = k \ln W(m = N/2) - k \ln W(m = N/2+1) = k \ln \frac{W_N(m=N/2)}{W_N(m=N/2+1)} = k \ln \frac{(N/2+1)!(N/2-1)!}{(N/2)!(N/2)!} = k \ln \frac{N/2+1}{N/2} \approx \frac{2k}{N}$. Таким образом, поворот одного спина в упорядоченной системе отвечает такому изменению энтропии, которое соответствовало бы повороту $\frac{\Delta S_{N \rightarrow N-1}}{\Delta S_{N/2 \rightarrow N/2-1}}$ спинов в неупорядоченной системе, где $\frac{\Delta S_{N \rightarrow N-1}}{\Delta S_{N/2 \rightarrow N/2-1}} \approx \frac{N \ln N}{2}$.

Приготовим две подсистемы: пусть 1-ая “измеряемая” подсистема в результате предварительного адиабатического размагничивания полностью упорядочена; 2-ая “измерительная” подсистема наоборот полностью разупорядочена и связана с входной катушкой трансформатора потока чувствительного DC-SQUID’а. Приведем обе подсистемы в тепловой контакт, таким образом, чтобы от “внешнего мира” они остались бы адиабатически изолированы. Последнее условие означает что $\Delta S_{1+2} = 0$ и следовательно $\Delta S_1 = -\Delta S_2$, т.е. обе подсистемы “общаются энтропийно”. При этом переворот одного спина, разупорядочивающий 1-ую подсистему, приведет к такому увеличению порядка во 2-ой подсистеме, когда в ней в общей сложности должно повернуться количество спинов, сопоставимое с их числом во всей подсистеме $\frac{N \ln N}{2} \sim N$. Оценим минимальное количество спинов, которое должно содержаться в “измерительной” подсистеме, чтобы SQUID по магнитному отклику 2-ой подсистемы смог зафиксировать переворот одного спина в 1-ой подсистеме. Практически “измерительная” подсистема может представлять собой парамагнитный цилиндр высотой h , размещенный коаксиально внутри входной приемной катушки сверхпроводящего трансформатора потока SQUID’а. Тогда переворот во 2-ой подсистеме ΔN_2 спинов вызовет изменение потока в приемной катушке $\Delta \Phi = \frac{2\mu_0 \mu_B \Delta N_2}{h}$, где $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ Г/м}$ – магнитная проницаемость вакуума, а $\mu_B = 0.927 \times 10^{-23} \text{ Дж/Тл}$ – магнетон Бора. Выбирая отнюдь не рекордное для современных SQUID’ов [13] разрешение по потоку $\Delta \Phi = 10^{-5} \Phi_0 \approx 2 \times 10^{-20} \text{ Вб}$ в полосе 1 Гц, получим при $h = 1 \text{ см}$ $\Delta N_2 = \frac{h \Delta \Phi}{2\mu_0 \mu_B} \approx 10^7 \text{ спинов}$, что соответствует обычному парамагнетизму с относительно низкой концентрацией спинов, что, в свою очередь позволит в такой системе избежать ферромагнитного перехода даже при температуре в несколько единиц милликельвин [10].

Таким образом предложенная схема, использующая эффект усиления магнитного отклика, возникающий при контакте первоначально упорядоченного и разупорядоченного парамагнетиков, а также SQUID в качестве регистратора уже усиленного магнитного отклика, указывает реализуемый путь постановки эксперимента, в котором может быть зафиксировано изменение спинового состояния одного электрона или ядра.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] D e u t s c h D. Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer. Proc.R.Soc.Lond., A **400**, No.1818, 97 (1985).
- [2] K a n e B. E. Nature, **393**, 133 (1998).

- [3] В а л и е в К. А., К о к и н А. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. Москва-Ижевск, РХД, 2001.
- [4] Д о б р у а к о в S. N. in: Bioaktive Spin Labels. R. I. Zhdanov(Ed). Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, 1992, p. 215.
- [5] В е н с и н и А., G a t t e s c h i D. Electron Paramagnetic Resonance. in: Exchange Coupled System. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, 1990, p.21.
- [6] Д о б р я к о в С. Н., М а м а т к у л о в а А. К. Ж.физ.химии, **69**, N 3, 476 (1995).
- [7] Д о б р я к о в С. Н., М а м а т к у л о в а А. К., Б а р а б а н о в а Н. Н. Хим. физика, **16**, N 5, 76 (1997).
- [8] С т и н Э. Квантовые вычисления. Ижевск, НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2000.
- [9] S h o r P. W. SIAM Journal of Computing, **26**, 1484 (1997) (electronic version: LANL e-print quant-ph/9508027, <http://xxx.lanl.gov>)
- [10] Л о и н а с т а а О. V. Experimental principles and methods below 1K. (London and New York: Academic Press, 1974).
- [11] Г о л о в а ш к и н А. И., Ж е р и х и н а Л. Н., М и ш а ч е в В. М. и др. ЖПФ, N 6, 27 (2003).
- [12] К о л м о г о р о в А. Н., Ж у р б е н к о И. Г., П р о х о р о в А. В. Введение в теорию вероятностей. М., Наука, 1982.
- [13] С л а г к е J. Physics Today, **39**, N 3, 36 (1986).

Поступила в редакцию 23 августа 2006 г.