

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Квантовая радиофизика

Лекция 7

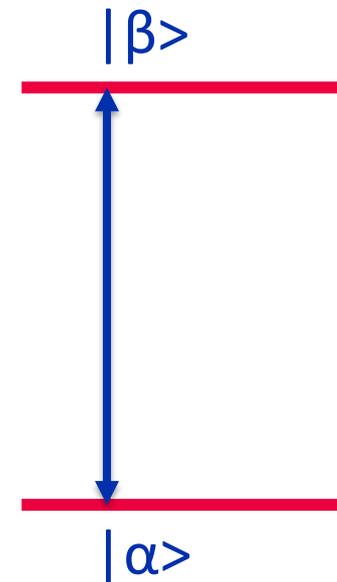
Санкт-Петербург, 2018

Матрицы плотности



Анализ систем спинов

- ✓ Возможные состояния для системы из одной частицы со спином $\frac{1}{2}$
- ✓ В магнитном поле допустимы два энергетических состояния





Волновые функции в системе

- ✓ Линейная комбинация возможных состояний

$$|\Psi\rangle = c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle$$

- ✓ Измерение величины (оператора)

$$\langle \Psi | M_x | \Psi \rangle = \sum_{n,m=\alpha,\beta} c_m^* c_n \langle m | M_x | n \rangle$$



Матрицы плотности

- ✓ Частые члены при измерении величин (с учетом усреднения по ансамблю)

$$\overline{c_m^* c_n} = \rho_{m,n}$$

- ✓ Измерение величины (оператора)

$$\langle M_x \rangle = \text{Tr } M_x \rho$$



Временная эволюция матриц плотности

- ✓ Из подстановки разложения волновой функции в базис в уравнение Шредингера можно получить уравнение Лиувилля-фон Неймана

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -i[H, \rho(t)]$$

- ✓ Решение уравнения (для стационарного Гамильтониана) – временная эволюция матриц плотности

$$\rho(t) = e^{-iHt} \rho(t) e^{iHt}$$



Операторы спина

- ✓ Операторы спина (нормированного на $\hbar/2\pi$) для частицы с $l=1/2$ – матрицы Паули

$$I_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad I_y = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad I_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- ✓ Собственные вектора

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |\beta\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$



Операторы вращения

- ✓ Операторы вращения вокруг осей (x и y)

$$U_x = \begin{bmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -i \sin \frac{\phi}{2} \\ -i \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{bmatrix}$$

$$U_y = \begin{bmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -\sin \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{bmatrix}$$



Пример поворота

✓ FID (-90° вокруг x из состояния I_z)

$$U_x I_z U_x^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -i \sin \frac{\phi}{2} \\ -i \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & i \sin \frac{\phi}{2} \\ i \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{bmatrix} = I_y$$



Комплексная намагниченность

✓ FID (-90° вокруг x из состояния I_z)

$$M = I_x + iI_y = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Tr}(MI_y) = \frac{i}{2}$$



Временная эволюция матриц

- ✓ Временная эволюция определяется гамильтонианом взаимодействия

$$M(t) = U_H M(0) U_H^{-1} = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} M(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t}$$

- ✓ Для гамильтониана Зеемановского взаимодействия

$$U_H = e^{i\omega I_z t} = \begin{bmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix}$$



Временная эволюция I_y

- ✓ После поворота в плоскость x-y

$$I_y(t) = \begin{bmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{bmatrix}$$

- ✓ Поперечная намагниченность

$$\text{Tr}(MI_y) = \frac{i}{2} e^{-i\omega t}$$



Матрицы плотности

$$I_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad U_x = \begin{bmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -i \sin \frac{\phi}{2} \\ -i \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{bmatrix}$$

$$I_y = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$I_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad U_y = \begin{bmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -\sin \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{bmatrix}$$

$$U_H = \begin{bmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix}$$



Спиновое эхо

$$U_x^{90} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix}$$

$$U_x^{180} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{bmatrix}$$

$$U_H(\tau) = \begin{bmatrix} e^{i\omega\tau/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega\tau/2} \end{bmatrix}$$

$$M_{\perp} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Tr}(M_{\perp} U_H U_x^{180} U_H U_x^{90} I_z U_x^{90-1} U_H^{-1} U_x^{180-1} U_H^{-1})$$



Операторное представление

✓ Рассмотрим результат действия матриц поворота

$$U_x I_z U_x^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \cos \phi & i \sin \phi \\ -i \sin \phi & -\cos \phi \end{bmatrix}$$

$$U_x I_y U_x^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sin \phi & -i \cos \phi \\ i \cos \phi & -\sin \phi \end{bmatrix}$$

$$U_x I_x U_x^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$



Операторное представление

✓ Для различных комбинаций поворотов

$$U_x I_z U_x^{-1} = \cos \phi I_z - \sin \phi I_y$$

$$U_x I_y U_x^{-1} = \cos \phi I_y + \sin \phi I_z$$

$$U_x I_x U_x^{-1} = I_x$$

$$U_y I_z U_y^{-1} = \cos \phi I_z + \sin \phi I_x$$

$$U_y I_x U_y^{-1} = \cos \phi I_x - \sin \phi I_z$$

$$U_y I_y U_y^{-1} = I_y$$



Операторное представление

✓ Вращение вокруг оси z , эволюция

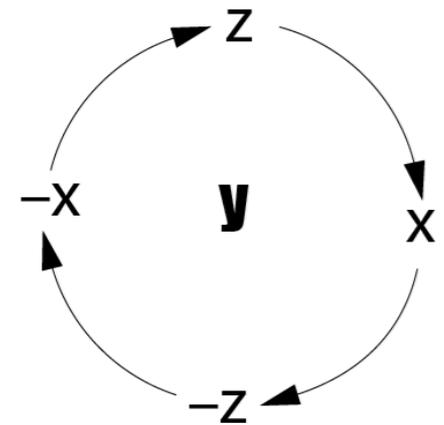
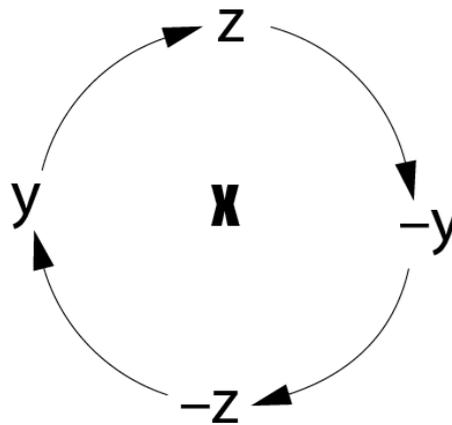
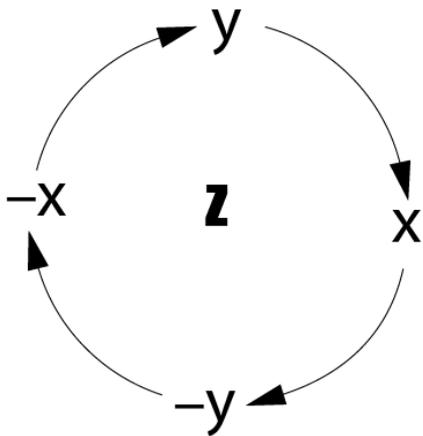
$$U_H I_x U_H^{-1} = \cos \omega t I_x - \sin \omega t I_y$$

$$U_H I_y U_H^{-1} = \cos \omega t I_y + \sin \omega t I_x$$

$$U_H I_z U_H^{-1} = I_z$$

Операторное представление

✓ Дополнительные вращения





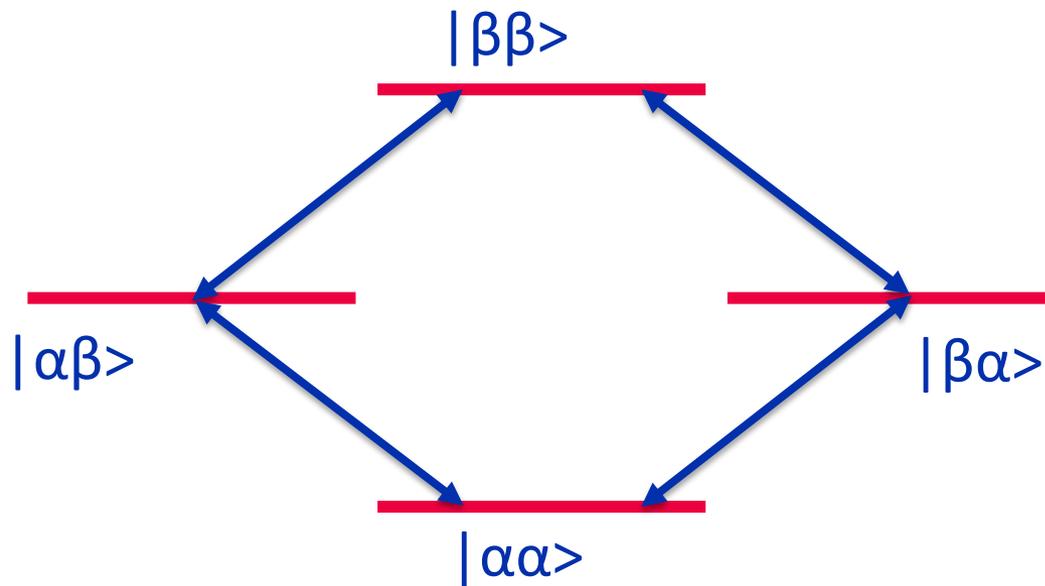
Операторное представление

- ✓ Спиновое эхо
- ✓ $I_z \rightarrow -I_y$
- ✓ $-I_y \rightarrow -\cos(\omega\tau)I_y - \sin(\omega\tau)I_x$
- ✓ $-\cos(\omega\tau)I_y - \sin(\omega\tau)I_x \rightarrow \cos(\omega\tau)I_y - \sin(\omega\tau)I_x$
- ✓ $\cos(\omega\tau)I_y - \sin(\omega\tau)I_x \rightarrow \cos(\omega\tau)(\cos(\omega\tau)I_y + \sin(\omega\tau)I_x) - \sin(\omega\tau)(\cos(\omega\tau)I_x - \sin(\omega\tau)I_y) = I_y$

Матрицы плотности для системы спинов

Анализ системы связанных спинов

- ✓ Возможные состояния





Волновые функции в системе

- ✓ Линейная комбинация возможных состояний

$$|\Psi\rangle = c_{\alpha\alpha}|\alpha\alpha\rangle + c_{\alpha\beta}|\alpha\beta\rangle + c_{\beta\alpha}|\beta\alpha\rangle + c_{\beta\beta}|\beta\beta\rangle$$

- ✓ Измерение величины (оператора)

$$\langle\Psi|M_x|\Psi\rangle = \sum_{n,m=\alpha\alpha,\alpha\beta\dots} c_m^* c_n \langle m|M_x|n\rangle$$



Система двух спинов AX

- ✓ 2 связанных спина с $l=1/2$

$$|\Psi\rangle = c_{\alpha\alpha}|\alpha\alpha\rangle + c_{\alpha\beta}|\alpha\beta\rangle + c_{\beta\alpha}|\beta\alpha\rangle + c_{\beta\beta}|\beta\beta\rangle$$

- ✓ Измерение физической величины

$$\langle\Psi|M|\Psi\rangle = \sum_{n,m=\alpha\alpha,\alpha\beta,\beta\alpha,\beta\beta} c_m^* c_n \langle m|M|n\rangle$$

- ✓ 16 элементов матрицы плотности



Система двух спинов AX

- ✓ 16 матриц физических величин – результатов прямого произведения матриц величин каждого спина

$$A_x = I_x \otimes E = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

.
. .
. . .



Система двух спинов AX

✓ Аналогично 4 собственных вектора

$$|\alpha\alpha\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |\alpha\beta\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$|\beta\alpha\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |\beta\beta\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$



Система двух спинов AS

- ✓ Намагниченности каждого спина

$$\begin{aligned} A_x &= I_x \otimes E & A_y &= I_y \otimes E & A_z &= I_z \otimes E \\ S_x &= E \otimes I_x & S_y &= E \otimes I_y & S_z &= E \otimes I_z \end{aligned}$$

- ✓ Связанные спиновые намагниченности (x2)

$$2A_x S_y = 2I_x \otimes I_y \qquad 2A_y S_x = 2I_y \otimes I_x$$

- ✓ Противофазные намагниченности (x2)

$$2A_x S_z = 2I_x \otimes I_z \qquad 2A_z S_x = 2I_z \otimes I_x$$

- ✓ Двойная противофазная намагниченность

$$2A_z S_z = 2I_z \otimes I_z$$



Система двух спинов AS

- ✓ Состояния с явной намагниченностью

$$|\Psi\rangle = |\alpha\alpha\rangle$$

$$|\Psi\rangle = 1/\sqrt{2}|\alpha\alpha\rangle + 1/\sqrt{2}|\alpha\beta\rangle$$

$$|\Psi\rangle = i/\sqrt{2}|\beta\alpha\rangle + 1/\sqrt{2}|\alpha\alpha\rangle$$

- ✓ Состояния с коррелирующей намагниченностью

$$|\Psi\rangle = 1/\sqrt{2}|\beta\alpha\rangle + 1/\sqrt{2}|\alpha\beta\rangle$$



Система двух спинов AS

- ✓ Операторное представление импульсов (аналогично случаю спина одного типа)

$$A_z S_z \rightarrow \phi_x^S \rightarrow A_z (\cos \phi S_z - \sin \phi S_y)$$

$$A_z S_z \rightarrow \phi_x^A \rightarrow (\cos \phi A_z - \sin \phi A_y) S_z$$

- ✓ Операторное представление вращения (аналогично случаю спина одного типа)

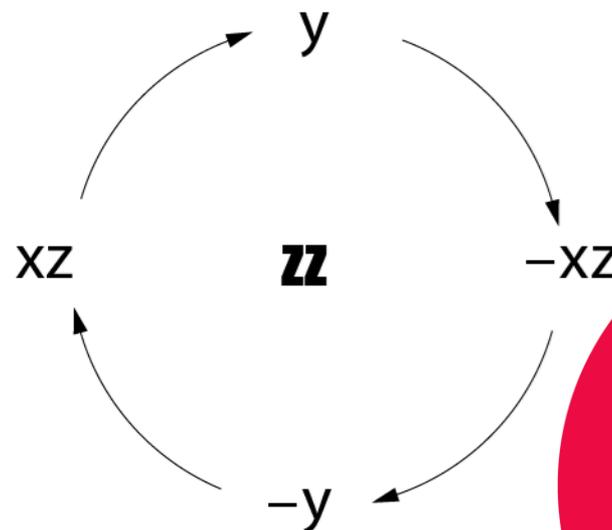
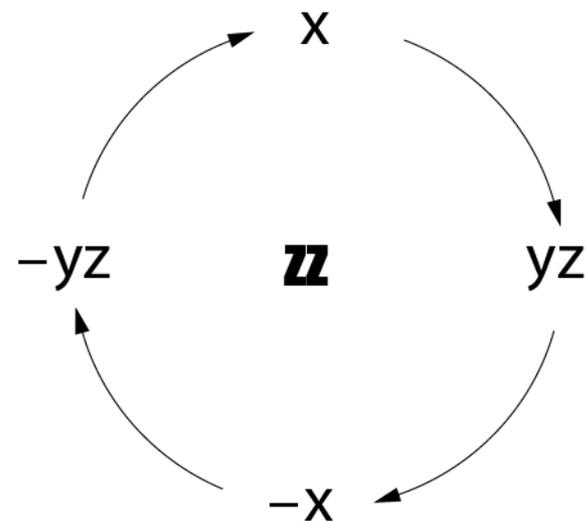
$$A_z S_y \rightarrow \tau \rightarrow A_z (\cos \omega_s \tau S_y + \sin \omega_s \tau S_x)$$

Система двух спинов AS

- ✓ Перенос когерентности

$$A_z S_y > 90_x^{AS} > -A_y S_z$$

- ✓ Эволюция вследствие скалярного взаимодействия





Система двух спинов AS

- ✓ Скалярное взаимодействие в спиновом эхе

$$A_x > \tau > 180 \frac{AS}{x} > \tau$$

- ✓ Только фаза, вследствие скалярного взаимодействия

$$A_x \rightarrow \cos(\pi J_{AS}\tau) A_x + \sin(\pi J_{AS}\tau) A_y S_z$$

- ✓ Инверсия A относительно оси x

$$\sin(\pi J_{AS}\tau) A_y S_z \rightarrow -\sin(\pi J_{AS}\tau) A_y S_z$$

- ✓ Инверсия S относительно оси x

$$-\sin(\pi J_{AS}\tau) A_y S_z \rightarrow \sin(\pi J_{AS}\tau) A_y S_z$$



Система двух спинов AS

- ✓ Перенос синфазной намагниченности в противофазную
- ✓ Спиновое эхо со временем эволюции $\tau = 1/4J_{AS}$

$$A_x > \tau > 180_x^{AS} > \tau > A_y S_z$$

- ✓ Спиновое эхо с селективным импульсом

$$A_x > \tau > 180_x^A > \tau$$

$$A_x > \tau > 180_x^S > \tau$$

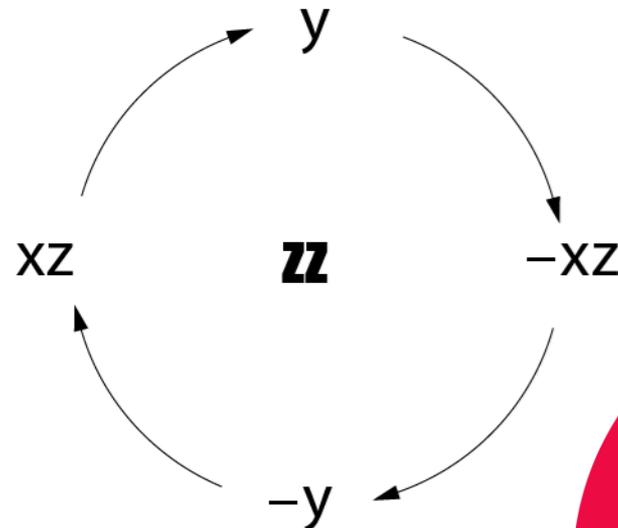
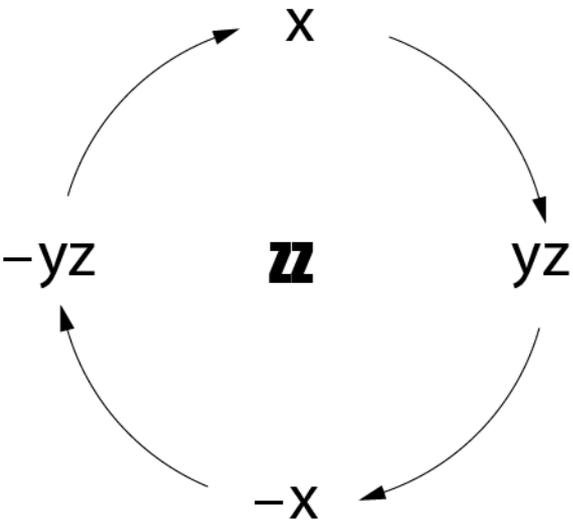
- ✓ После инверсии

$$\cos(\pi J_{AS}\tau) A_x - \sin(\pi J_{AS}\tau) A_y S_z \rightarrow A_x$$

Система двух спинов AS

- ✓ INEPT
- ✓ Время эволюции $\tau = 1/4J_{AS}$

$$A_z \rightarrow 90_x^A \rightarrow \tau > 180_x^{AS} \rightarrow \tau > 90_y^{AS} \rightarrow \tau > 180_x^{AS} \rightarrow \tau$$



$$A_x \rightarrow \cos(\pi J_{AS}\tau) A_x + \sin(\pi J_{AS}\tau) A_y S_z$$