Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Klaszter közelítésen alapuló szimulációs módszerek fejlesztése ponthiba kvantumbitek vizsgálatához

Témavezető:
Dr. Ivády Viktor
Egyetemi Adjunktus

Szerző:
Bene Róbert
Fizika BSc III.év

Budapest, 2022

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés **3**

2. Elméleti háttér **6**

2.1. Kvantumbitek és spinorok 6
2.2. Kevert állapotok kvantummechanikája 7
2.3. Sűrűségoperátorok tulajdonságai 8
2.4. Sűrűségoperátorok időfejlődése 9
2.5. Fő posztulátumok sűrűségoperátorokra 10
2.6. Sűrűségmátrix vizualizációja, a Bloch-gömb 10
2.7. Összetett rendszerek és a redukált sűrűségoperátor 12
2.8. Nyitott rendszerek és a Lindblad-egyenlet 14
2.9. Elméleti háttér összegzése 15

3. Kutatási eredmények I. - Elméleti megfontolások **17**

3.1. Fejlesztett modell bevezetése és ismertetése 17
3.2. Klaszter közelítésekről általánosan 20
3.3. A sort definiáló összegszabály 22
3.4. Megmaradási tételek a sorfejtésben 25
3.4.1. S_z operátor várható értékének megmaradása 25
3.4.2. Energia megmaradás elsőrendben 27
3.4.3. Általános operátor megmaradás feltételei elsőrendben 28
3.4.4. Egy speciális szimmetria másod és magasabb rendekben . . . 30
3.5. A közelítés optimalizációja 31
3.6. Elméleti eredmények rendszerezése és összegzése 33

4. Kutatási eredmények II. - Numerikus implementáció **34**

4.1. Runge-Kutta a közelítés időfejlődésére 34
4.2. Unitér operátor a korrekcióhoz 35
4.3. Nitrogén-vakancia centrum, mint releváns fizikai rendszer 38
4.4. Szimulációk és eredményeik 40
4.4.1. Egzakt és közelítő módszerek összehasonlítása 40
4.4.2. Magasabbrendű közelítések 44
4.4.3. Konvergencia vizsgálata 45

4.4.4. Nitrogén-Vakancia centrum időfejlődése 47
4.5. Numerikus számítások eredményeinek összegzése és értékelése 49

5. Összefoglalás, kitekintés és jövőbeli tervek **51**

1. fejezet

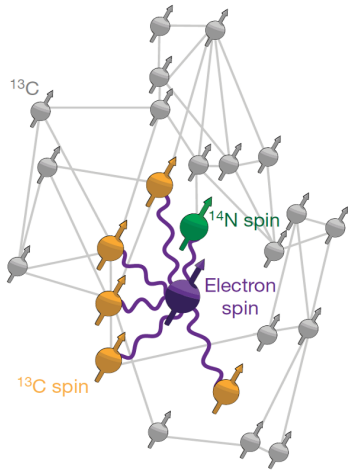
Bevezetés

A kvantumszámítógépek elméleti alapjainak vizsgálata kiemelt szerepet kap a fizikai kutatásokban napjainkban. Egyik kulcsterülete a kvantumszámítógépek megvalósíthatóságáról és használhatóságáról szóló elmélkedéseknek, az ezeknek a mérete, illetve az alkalmazásukkal megoldható problémák milyensége. Tradicionálisan elterjedt kép, hogy a kvantumszámítógépek egyfajta kvantum központi számítógépként funkcionálva, kiemelten komplex és fontos feladatok ellátására legyenek használatosak. Ennek oka, hogy a napjainkban elérhető hardverek óriási, nehezen mozdítható, komplex szerkezetek amelyek működéséhez rendívül alcsony hőmérséklet és speciális körülmények szükségesek. Ilyen módon az alkalmazási lehetőségeket illetően hasonlatos az elgondolás ahhoz, mint az 1960-as években a klasszikus számítógépek megszületése esetén felvázolt potenciális forgatókönyvek, azaz speciálisan erre alkalmas intézményekben, szűk körben használva.

Ismert azonban, hogy a klasszikus számítógépek esetén a jövő mást hozott, hiszen a mikroprocesszorok megjelenése alapjaiban változtatta meg a lehetőségeikről szóló elgondolásokat. Most, a 21. században a kvantum számítógépek használatáról gondolkodva szükségszerűen felmerül bennünk, hogy hasonló változásra van-e lehetőség. Potenciális jelöltek ezen vátozás hajtóerejként az úgynevezett kvantum gyorsítók[1], melyek méretükben viszonylag kicsik, összemérhetőek a klasszikus hardverekkel, és szobahőmérsékleten képesek üzemelni. Ilyen rendszerek előállításához kettő kifejezetten jelentős problémát mindenképpen szükséges áthidalni, ezek pedig a zajok kezelése összetett rendszerekben valamint a szobahőmérsékleten és nyomáson való hatékony működés.

A szilárd-test fizikai rendszerekben fellelhető spin kvantumbitek (kubit) kiemelten ígéretes lehetőségekkel kecsegtetnek a kvantumszámítógépek és kvantuminternet megalkotásának területén, melyet a közelmúltban ezen a területen végrehajtott számos kísérlet is alátámaszt.[2, 3, 4] A szobahőmérsékleten működő kvantumszámítógépek legígéretesebb jelöltje a gyémántban található nitrogén-vakancia (NV) centrumot[5] használó kvantumos eszközök.[1, 6] Ezek a kvantumszámítógépek ún.

processzor node-okat tartalmaznak[4, 7], melyek mindegyike NV centrumokból áll, mely egy ponthiba a gyémánt kristályszerkezetében és egy nitrogén szubsztitúciós atommal valamint egy a szomszédjában fellépő vakanciával jellemezhető. A node részét képezi ezen felül átlagban 4-10 darab ^{13}C magspin is, ezek funkcionálnak a számítógép kubitjeiként, az NV centrumok pedig lehetővé teszik ezek inicializációját, kiolvasását, valamint az intra és inter node műveleteket multi-kubit rendszerekben.[1, 7] Egy, a valóságban is létező [8] kvantum node látható a 1.1 ábrán.



1.1. ábra. Gyémánt NV centrumon alapuló kavantum node vázlatos felépítése. Látható a központi NV centrum valamint az ezzel kölcsönható magspinek is.

A rendszer különböző tulajdonságai rádió, mikro és optikai hullámhossztartományú mágneses mezőkkel kontrollálhatók. Szobahőmérsékelten és nyomáson megvalósítható alkalmazások esetén a gyémánt NV centrum kecsegtet a legígéretesebb lehetőségekkel[1, 2], éppen ezért fontos jelen kutatásunk is. Jelentőségét többek között az adja, hogy az elektronspin inicializáció és kiolvasás a már említett körülmények között megtartja a magas fidelitást, valamint az elektronspin koherencia ideje magas, közelítőleg 1.8 ms[9], ami az összes ismert szilárdtest elektronspin kubit közül a legmagasabb szobahőmérsékleten. Ezek együttesen alkalmassá teszik az NV centrumot, hogy hatékony mediátorként használjuk inicializálásra és kiolvasásra az egyébként gyengén kölcsönható, erősen koherens magspinekre vonatkozóan.

Fontos megemlíteni azonban, hogy a kvantum node-ban foglalt magspineken felül számos más magspin illetve távoli elektron spin is megtalálható még a befogadó agyag rácsszerkezetében. Ezen spinek a node-ok legjelentősebb zajforrásai és ők okozzák a rendszer dekoherenciáját.[4, 10] A közelmúltban folyatott elméleti kutatások rámutattak, hogy az NV centrum koherencia idejének a meghatározásához nagyságrendileg 10^3 közeli magspint kell figyelembe venni.[10] Ugyanekkor, a 1.1 ábra jó illusztrálja, hogy a node és kvantumos környezete alig különíthető el. Az hogy éppen mely közeli magspineket használják a kvantum node kvantumbitjeként és melyeket nem, egy önkényes választás. A kvantum node-ok illetve közvetlen kör-

nyezetük által alkotott komplex kvantumos rendszerek dinamikájának a modellezése és numerikus szimulációja egy a mai napig megoldatlan probléma. Ezen a területen folyatott kutatások a fizikai tudományok élvonalába tartoznak.

Munkám során fő célom egy klaszter közelítésen alapuló eljárás kifejlesztése volt, mely alkalmas kölcsönható sok spin rendszerek időfejlődésének szimulálására, olyan módon, mely a Markovi-közelítésen túlmutat és számottevően pontosabb mint az eddig kifejlesztett módszerek. Célkitűzéseim közt szerepelt, hogy az alábbi, a vizsgált fizikai rendszer pontos és hatékony leírása szempontjából fontos kritériumok közül minél többet teljesíteni tudjon a kifejlesztett módszer:

1. A központi rendszer (kvantum node) Hamilton-operátorának a közelítésekre ne legyen szükség, a vizsgált rendszerekben az egzakt Hamilton-operátorokkal lehessen dolgozni.

2. A központi rendszer és környezetének kölcsönhatási operátorának a közelítésére ne legyen szükség.

3. A közelítések mértéke jól kontrollálható legyen, valamint a közelítés pontossága szisztematikusan javítható legyen.

4. A közelítés legyen konvergens, azaz megfelelő rendben (később részletezett feltételek mellett) a vizsgált rendszer egzakt időfejlődését adja vissza.

5. Az egzakt időfejlődés során teljesülő megmaradási tételek közül minél több teljesüljön a sorfejtés által meghatározott időfejlődés mellett.

6. A sorfejtés ne eredményezzen a rendszer paraméterei által nem indokolt dekoherenciát.

7. Az általunk bevezetett sorfejtés speciális eseteként álljon elő a területen jelenleg legkorszerűbb általánosított klaszter korrelációs kifejtés módszer (gCCE)[11].

8. A módszertől elvárjuk, hogy elég hatékony legyen ahhoz, hogy impletmentálva korábban hatékonyan nem vizsgálható méretű rendszerek időfejlődésének szimulációjára is lehetőséget adjon.

A dolgozatban ismertetett diákköri munkám eredményeként kifejlesztetem 1) egy új közelítő módszert, amely a fenti kritériumok szinte mindennyikét teljesíti, 2) levezettem megmaradási tételeket az új közelítésből, 3) implementáltam valós idejű numerikus szimulációs módszereket, amelyek sok-spin rendszerek egzakt és közelítő időfejlődését írják le, 4) összehasonlító numerikus szimulációkat végeztem különböző modell rendszerek dinamikáján, és 5) szimuláltam egy valós 27 spinből álló NV centrum kvantum node dinamikáját.

2. fejezet

Elméleti háttér

A fejezetben a kutatásom során fejlesztett elméleti modell, illetve annak implementációjának megértéséhez szükséges elméleti háttéranyagot ismertetem, mely háttéranyag nagyrésze a kötelező tananyag keretein kívül esik. Az alábbiak megértése szükséges munkám értelmezéséhez és az itt bevezetett fogalmakra a dolgozat hátralévő részében rendszeresen hivatkozom. Az elméleti alapozásban a széleskörben ismert, kvantummechanikában használatos sűrűségmátrix formalizmus ismertetése mellett kitérek a Lindblad-egyenlet által vezérelt Markovi-időfejlődés bemutatására is, melynek felülmúlása kutatómunkám egyik fő célja volt.

2.1. Kvantumbitek és spinorok

Közismert, hogy a spin, mint kvantummechanikai mennyiség matematikai szempontból a 3 dimenziós forgatás csoport, azaz az SO(3) csoport szimmetriáin keresztül kerül bevezetésre. Ezen csoport irreducibilis ábrázolásai közül az 1/2-es indexű ábrázolás szerint transzformálódó objektumokat nevezzük spinoroknak, melyek egyben az SU(2) csoportnak is ábrázolásai (lévén ez SO(3) univerzális fedőcsoportja). Azért kiemelten fontosak ezek az objektumok ezen dolgozat kapcsán, mert a kvantumbitek állapotai is ezekkel reprezentálhatók, és a kubitek dinamikájának tárgyalása a dolgozat fő fókusza.

Rendszeresen használni fogom a kutatás ismertetése folyamán a kvantumbitek időfejlődésére vonatkozó ismereteket is. Ez egy unitér időfejlesztő operátorral történik, melynek generátorelemei az SO(3) spinor ábrázolásához tartozó generátor elemek konstans szorosai, alább láthatóak.

$$S_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

Ezekre hivatkozom majd a későbbiekben Spin x,y,z operátorokként, jelölésben S_x, S_y, S_z. Ezekből a tetszőleges unitér időfejlesztés a következő formula szerint zajlik,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(a_0 I + \vec{a}\vec{S})t}|\psi(0)\rangle \tag{2.2}$$

ahol $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$, $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$, $\quad a_i \in \mathbb{R}$. Fontos megjegyezni, hogy ez a formalizmus ugyan nagyon hasznos zárt rendszerek esetén, összetett rendszerekben célszerűbb egy ebből származtatott egyéb formalizmust bevezetni, melyet alább ismertetek.

2.2. Kevert állapotok kvantummechanikája

A fentebb leírtak szerint, hagyományosan a kvantummechanikai rendszerek leírása során az objektumok állapotait az adott Hilbert-tér ún. állapotvektoraival reprezentáljuk, melyek segítségével és az adott Hilbert-téren ható operátorokkal aztán definiálni lehet fizikai mennyiségeket, meg lehet adni az időfejlődést és vizsgálni egy rendszer egyéb tulajdonságait. Amíg tiszta állapotokkal dolgozunk ez a formalizmus tökéletesen megállja a helyét, azonban ahogy ebből kilépünk és kevert állapotokat is figyelembe veszünk, indokolttá válik egy új formalizmus bevezetése. Mielőtt ennek bemutatásába bele kezdek, fontos definiálni a tiszta és kevert állapotokat.

- Tiszta állapotoknak az állapotvektorokat tartalmazó Hilbert-térben található egyre normált vektorokat nevezzük.
- Kevert állapotoknak a tiszta állapotokat valamilyen valószínűségi eloszlással tartalmazó halmazokat tekintem.

Tegyük fel, hogy nem egy állapotvektorunk van, hanem k darab $|\psi_i\rangle$-vel dolgozunk, és a rendszerünkről csak azt ismerjük, hogy $|\psi_i\rangle$ allapotban q_i valószínűséggel tartózkodik. Ha egy ismert $|\psi_i\rangle$ állapoton valamilyen mérést hajtunk végre M_k mérési operátorral, akkor ezen mérés eredménye az alábbi alakban adható meg [12]

$$|\psi_i\rangle \mapsto \frac{M_k|\psi_i\rangle}{\sqrt{p_{k|i}}} \equiv |\psi_i\rangle^k, \tag{2.3}$$

ahol M_k teljesíti $\sum_k M_k^\dagger M_k = I$ egyenletet és $p_{k|i} = \langle\psi_i|M_k^\dagger M_k|\psi_i\rangle$, ami éppen a k sajátállapothoz tartozó valószínűség $|\psi_i\rangle$ állapotban. Ha nem ismerjük a kezdő $|\psi_i\rangle$-t, csak azt tudjuk, hogy az a $\{q_i, |\psi_i\rangle\}_{i=1}^N$ halmaz egy eleme, akkor annak a valószínűsége, hogy k értékét mérjük az alábbiak szerint számolható:

$$p_k = \sum_i p_{k|i} q_i = \sum_i q_i \langle\psi_i|M_k^\dagger M_k|\psi_i\rangle = \mathrm{Tr}\left[M_k^\dagger M_k \left(\sum_i q_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right)\right], \tag{2.4}$$

ahol bevezetjük

$$\rho = \sum_i q_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \tag{2.5}$$

Ezt nevezzük sűrűségmátrixnak, vagy sűrűségoperátornak. Ezen formalizmus előnye már pusztán abban is megjelenik, hogy az előbbi p_k számolása használatával az alábbi formulára rövidül

$$p_k = \mathrm{Tr}(M_k^\dagger M_k \rho). \tag{2.6}$$

Érdemes megemlíteni, hogy ha nem csak a p_k-ra, de a mérés után adódó állapotra is kíváncsiak vagyunk, a sűrűségoperátor formalizmust használva az is könnyen megkapható. Tudván, hogy nem ismerjük melyik $|\psi_i\rangle$ volt a kezdőállapotunk, a mérés után kapott k állapotot úgy kapjuk meg, hogyha minden $|\psi_i\rangle$ k-adik komponenséből elkészített sűrűségoperátort összeszummázzuk, melyből rövid levezetés után az alábbi eredmény adódik [12]

$$\rho_k = \frac{M_k \rho M_k^\dagger}{\mathrm{Tr}(\rho M_k^\dagger M_k)}. \tag{2.7}$$

Ilyen módon tehát az állapotvektoron végrehajtott és a sűrűségoperátoron végrehajtott mérés, látható analógiával az alábbi formulákban áll elő

$$|\psi^k\rangle = \frac{M_k|\psi\rangle}{\sqrt{p_k}}, \qquad \rho_k = \frac{M_k \rho M_k^\dagger}{p_k}. \tag{2.8}$$

2.3. Sűrűségoperátorok tulajdonságai

A sűrűségoperátorok három fő tulajdonsággal rendelkeznek [12], melyek mindegyike a kvantummechanika alapvető megfontolásaiból következik és melyek mindegyikét valamilyen módon ki fogom használni dolgozatom során.

1. Egy sűrűségmátrix spurja mindig egy, hiszen

$$\mathrm{Tr}[\rho] = \sum_i q_i \,\mathrm{Tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|). \tag{2.9}$$

2. A sűrűségoperátorok hermitikusak, azaz

$$\rho^\dagger = \sum_i q_i^\dagger (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^\dagger = \sum_i q_i (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \rho. \tag{2.10}$$

3. $\forall \rho > 0$, azaz minden sűrűségoperátor pozitív szemidefinit, hiszen

$$\forall |v\rangle \in \mathcal{H}: \quad \langle\nu|\rho|\nu\rangle = \sum_i q_i |\langle\psi_i||v\rangle|^2 \geq 0. \tag{2.11}$$

2.4. Sűrűségoperátorok időfejlődése

A sűrűségoperátorok időfejlődése egyszerűen levezethető az állapotvektorok időfejlődéséből, melyet az alábbi, korábban már ismertetett formula ad meg

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle, \tag{2.12}$$

ahol $U(t)$ időfejlesztő unitér operátor a következő alakban áll elő

$$U(t) = e^{\frac{-i}{\hbar}Ht}. \tag{2.13}$$

Használjuk ismét a korábban már definiált tiszta állapotokból képzett halmazt, amely a következő:$\{q_i, |\psi_i\rangle\}_{i=1}^{N}$. Az ebben található állapotvektorok időfejlődése az alábbi

$$|\psi(t)_i\rangle = U(t)|\psi(0)_i\rangle. \tag{2.14}$$

Az ehhez a halmazhoz rendelt sűrűségoperátor időfejlődése pedig, a 2.14 formulát behelyettesítve a ρ-t definiáló képletbe

$$\rho(t) = \sum_i q_i |\psi(t)_i\rangle\langle\psi(t)_i| \tag{2.15}$$

$$\rho(t) = \sum_i q_i U(t)|\psi(0)_i\rangle\langle\psi(0)_i|U(t)^\dagger, \tag{2.16}$$

amiből

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U(t)^\dagger. \tag{2.17}$$

A mester-egyenlet a sűrűségoperátorokra pedig ebből már egyszerűen megkapható ha a 2.15 egyenletet deriváljuk

$$\dot{\rho}(t) = \sum_i q_i \left[\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi_i(t)\rangle \right) \langle\psi_i(t)| + |\psi_i(t)\rangle \left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_i(t)| \right) \right]. \tag{2.18}$$

Ha kihasználjuk, hogy Schrödinger-egyenlet adjungáltja az alábbi alakú

$$\dot{\langle\psi_j|} = \frac{i}{\hbar}\langle\psi_j|H, \tag{2.19}$$

És ezt visszaírjuk (2.18) egyenletbe, akkor adódik egy immáron kompaktabb alak a ρ időfejlődésére, melyet Neumann-egyenletnek is neveznek [12]

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}(H\rho - \rho H). \tag{2.20}$$

2.5. Fő posztulátumok sűrűségoperátorokra

Kihasználva a sűrűségoperátor már bevezetett tulajdonságait és a kezelésére vonatkozó szabályokat, a kvantummechanika főbb posztulátumait célszerű újra definiálni ezen formalizmus használatával [12], hiszen ezekre gyakran támaszkodtam kutatómunkám során.

1. A ρ állapotok $\mathcal{H}$ Hilbert-Schmidt tere olyan, hogy ebben $\forall\rho : \mathrm{Tr}(\rho) = 1$ és $\forall\rho > 0$, valamint a skaláris szorzat a következő módon van definiálva

$$(A, B) = \mathrm{Tr}(A^\dagger B)\, \forall A, B \in \mathcal{H}. \tag{2.21}$$

2. Norma a következő alakban definiálható

$$||\rho|| = \sqrt{(\rho, \rho)} := \sqrt{P}. \tag{2.22}$$

   Meggondolható, hogy ez éppen a már korábban definiált, tisztaságnak elnevezett mennyiség, hiszen

$$P \equiv Tr(\rho^2). \tag{2.23}$$

   Ez az érték a fenti azonosság és korábban már ismertetett megfontolások miatt mindig $P \leq 1$ lesz. Ha P=1, akkor az állapot tiszta, ha $P < 1$ akkor az állapot kevert.

3. Állapottok kompozíciója a sűrűségoperátorok tenzoriális szorzatainak segítségével valósítható meg, az alábbi formula szerint

$$\rho_{1,\ldots,N} = \bigotimes_{i=1}^{N} \rho_i. \tag{2.24}$$

4. Az időfejlődés megadható a korábban már ismertetett 2.20 egyenlet segítségével:

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}(H\rho - \rho H) \tag{2.25}$$

5. Egy általános mérés M_k operátorral $p_k = Tr(\rho M_k^\dagger M_k)$ értéket ad eredményül, és a mérés után kapott operátor:

$$\rho \to \frac{M_k \rho M_k^\dagger}{p_k} \tag{2.26}$$

2.6. Sűrűségmátrix vizualizációja, a Bloch-gömb

Ismert, hogy egy kvantumbit $|\psi_i\rangle$ kvantumállapota egy két dimenziós komplex Hilbert-térben ($\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$) 2×2-es komplex mátrixokkal reprezentálható, az aláb-

bi alakban:

$$\rho = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}. \tag{2.27}$$

Ismerve a sűrűségmátrix tulajdonságait, ezen mátrix elemeire bizonyos megszorításokat tehetünk. Tudjuk, hogy $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$, ilyen módon látható, hogy $d = 1 - a$ és mivel $\rho = \rho^\dagger$, azaz ρ hermitikus, az is igaz, hogy $c = b^*$ és $a \in \mathbb{R}$. A pozitív szemidefinit tulajdonság következménye, hogy ρ sajátértékei mind nemnegatívak, tehát a karakterisztikus egyenletet megoldva az alábbi formula írható fel

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{1 - 4|\rho|}). \tag{2.28}$$

Adódik a fentiekből, hogy a mátrix a következő alakot ölti

$$\rho = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & 1 - a \end{pmatrix}. \tag{2.29}$$

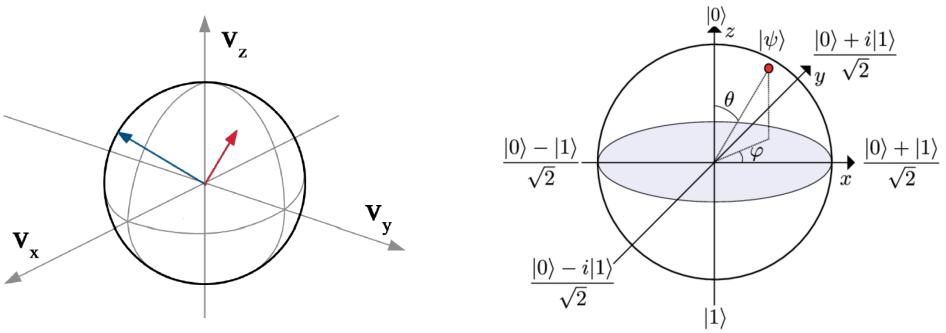
ennek parametrizálásához elég három valós paraméter, így az objektum természetesen leképezhető az $\mathbb{R}^3$ vektortérre. Mielőtt ezt megtesszük, érdemes megjegyezni, hogy mint arra már korábban utaltam, a 2x2 komplex mátrixok terén bázist alkotnak a σ_i-vel jelölt Pauli mátrixok, és tetszőleges mátrix ebben a térben kifejthető az alábbi módon

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{v} \cdot \vec{\sigma}). \tag{2.30}$$

ahol $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$,$v_i \in \mathbb{R}$ és $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ Ezekkel a kifejezésekkel megadva ρ-t az alábbi mátrix írható fel

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + v_z & v_x - iv_y \\ v_x + iv_y & 1 - v_z \end{pmatrix}. \tag{2.31}$$

Az ezen v_i komponensekből álló vektort nevezzük Bloch-vektornak, melyet a Bloch-gömb szemléletességét kiaknázva jól lehet használni 2×2 sűrűségmátrixok vizualizációjára. A 2.1 ábrán látható a Bloch-gömb és Bloch-vektor illusztrációja.



(a) Természetes beágyazás $\mathbb{R}^3$-ba

(b) Kvantumállapotok reprezentációja

2.1. ábra. Bloch-gömb és Bloch-vektorok vizualizációja

Célszerű ellenőrizni, hogy a Bloch-vektorból generált 2x2 mátrix egy megfelelő kvantumállapotot reprezentál-e. A $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$ a konstrukció feléptítése miatt automatikusan teljesül, valamint az alábbi formulából a pozitivitás is könnyen látható

$$det(\rho) = \frac{1}{4}(1 - \|v^2\|). \tag{2.32}$$

Ebből viszont következik, hogy

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \|\vec{v}\|) \rightarrow \|\vec{v}\| \leq 1. \tag{2.33}$$

Ezt kihasználva a Bloch vektor hosszával is definiálhatjuk a tisztaságot, mégpedig a következő módon. Mivel egy tiszta állapot sűrűség mátrixa projektor, triviális, hogy $\rho^2 = \rho$. Ezt felírva a Bloch-vektorral

$$\rho^2 = \frac{1}{4}(I + \vec{v} \cdot \vec{\sigma})(I + \vec{v} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{4}(I + 2\vec{v} \cdot \vec{\sigma} + (\vec{v} \cdot \vec{\sigma})^2). \tag{2.34}$$

Ennek spurját véve, és észben tartva hogy a Pauli mátrixok spurja 0, adódik

$$\mathrm{Tr}(\rho^2) = \frac{1}{2}(1 + \|\vec{v}\|). \tag{2.35}$$

Azaz az 1 hosszúságú Bloch-vektorok tiszta, az ennél kisebb hosszúságú vektorok pedig kevert állapotokat reprezentálnak.

2.7. Összetett rendszerek és a redukált sűrűségoperátor

Miután az egyszerű rendszerek leírására szolgáló metodológia tárgyalásra került, fontos megalapozni az összetett rendszerek leírásának módszereit is, hiszen jelen dolgozat fő célja az összetett rendszerekben tapasztalható spin-dinamikai jelenségek vizsgálata. Az egyszerűség kedvéért először csak egy kétkomponensű rendszert tekintsünk, melyben a kettő alrendszert jelölje A és B. Feltesszük, hogy a teljes rendszer ρ mátrix-szal jellemezhető, időfejlődése a már definiált Neumann-egyenlet szerint zajlik. Az alterek állapotait tartalmazó Hilbert terek az alábbiak:

$$\mathcal{H}_A = span\{|i\rangle_A\} \tag{2.36}$$

$$\mathcal{H}_B = span\{|\mu\rangle_B\}. \tag{2.37}$$

A teljes rendszer állapottere az alrendszerek állapottereinek tenzoriális szorzatából konstruálható, az alábbi módon:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B = span\{|i\rangle_A \otimes |\mu\rangle_B\}. \tag{2.38}$$

Ismét definiáljunk egy tiszta állapotokból álló halmazt a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben. Ezen állapotok mindegyike kifejthető $\mathcal{H}$ bázisvektorait használva,

$$|\psi\rangle_a = \sum_{i,\mu} c_{a;i\mu}|i\rangle_A \otimes |\mu\rangle_B. \tag{2.39}$$

Ebből következően az adódó sűrűségmátrix

$$\rho = \sum_a q_a(\sum_{i,\mu} c_{a;i\mu}|i\rangle_A \otimes |\mu\rangle_B)(\sum_{i,\mu} c^*_{a;i\mu}\langle i|_A \otimes \langle\mu|_B), \tag{2.40}$$

Azaz

$$\rho = \sum_{i,j,\mu,\nu} \lambda_{i,j,\mu,\nu}(|i\rangle_A\langle j| \otimes |\mu\rangle_B\langle\nu|). \tag{2.41}$$

Gyakran szükség van többkomponensű rendszer egy alrendszereként létező objektum állapotának a meghatározására, erre alkalmas eszközt a parciális trace eljárás ad. A parciális trace egy lineáris leképezés, ami a teljes Hilbert-Schmidt térből az egyik alrendszer Hilbert-Schmidt terébe képez, az alábbiak szerint. Legyen O operátor $M_A \otimes M_B$, és $O \in B(\mathcal{H}, \mathcal{H})$. Ekkor

$$\mathrm{Tr}_B(M_A \otimes M_B) = (M_A \cdot \mathrm{Tr}\, M_B) = \sum_u \langle\mu|[M_A \otimes M_B]|\mu\rangle, \tag{2.42}$$

ahol $\langle\mu|[M_A \otimes M_B]|\mu\rangle$ egy parciális mátrix elem, hiszen μ-k csak a $\mathcal{H}_B$-n hatnak. Az ilyen módon adódó operátor már csak $\mathcal{H}_A$-n hat. Miután tetszőleges $\tilde{O}$ operátor felírható az alábbi alakban

$$\tilde{O} = \sum_{i,j} l_{i,j}(M^i_A \otimes M^j_B), \tag{2.43}$$

a definiált $\mathcal{H}$ Hilbert-Schmidt tér minden operátorának parciális trace-e a következő alakban előáll

$$\mathrm{Tr}_B[\tilde{O}] = \sum_u \langle\mu|[\tilde{O}]|\mu\rangle. \tag{2.44}$$

Ezt felhasználva már sejthető, hogy a redukált sűrűségmátrix egy összetett rendszer sűrűségmátriából szintén a fenti módszerrel kapható meg, az alábbiak szerint

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B[\rho]. \tag{2.45}$$

2.8. Nyitott rendszerek és a Lindblad-egyenlet

Amennyiben nyitott kvantum rendszerek időfejlődését szeretnénk leírni, a hagyományos, korábban már tárgyalt, unitér időfejlesztő operátorokon alapuló megközelítés nem kielégítő.

Elég csak arra gondolni, hogy az unitér operátorokkal való időfejlesztés impliciten magába foglalja azon feltevéseket, hogy nincsenek disszipatív hatások és a koherencia az időfejlődés során változatlan. Mindezen feltevések mögött természetesen az a tény rejlik, hogy a rendszer összes szabadsági fokát ismerjük és számításba is vesszük. Valós fizikai rendszerek modellezésére a nyílt rendszerek sokkal jobban használhatók, hiszen ezen modellek éppen azon rendszerek leírására szolgálnak, melyek környezetüktől nem tökéletesen izoláltak, kölcsönhatnak vele. Természetesen ennek a környezettel való kölcsönhatásnak messzemenő implikációi lesznek. A rendszeren kívül eső szabadsági fokokkal való interakció maga után vonja, hogy a rendszer energiája bizonyos teljesítménnyel disszipálódik környezetébe illetve dekoherenciát és a fázisok változását is okozza.

Nyílt rendszerek időfejlődésének modellezésére egy elterjedt és jól bevált módszer az időfejlődés Lindblad-egyenlettel való modellezése. A Lindblad egyenlet az alábbi alakban áll elő:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)] + \sum_{\alpha} \gamma_\alpha \left(L_\alpha \rho(t) L_\alpha^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ L_\alpha^\dagger L_\alpha, \rho(t) \right\} \right), \tag{2.46}$$

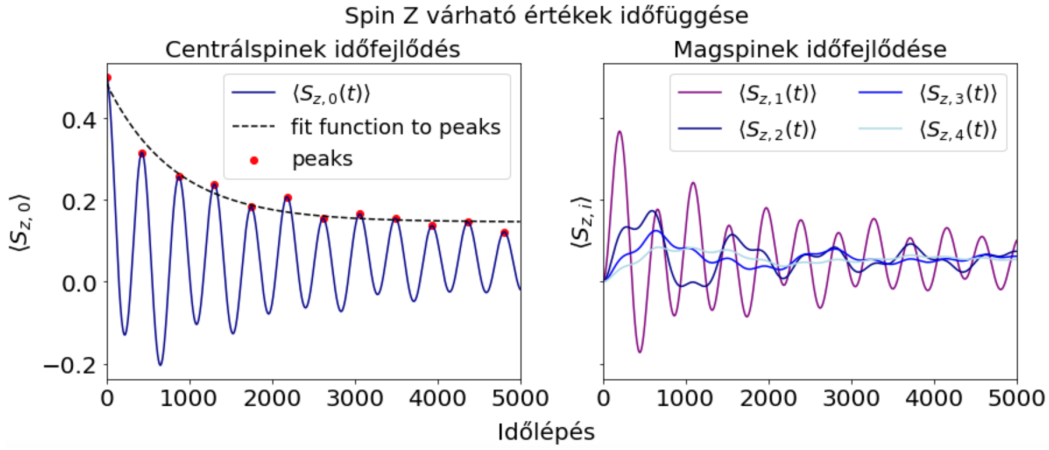
ahol az egyenlet jobb oldalának első tagja a már jól ismert, sűrűségmátrixok unitér időfejlődését leíró kommutátor-reláció, a második pedig a rendszer nyíltsága miatt az unitér időfejlődés mellett fellépő egyéb külső hatásokat leíró tag. A második tagot Lindbladiannak nevezzük, az L_α operátorokat pedig Lindblad-operátoroknak. A már korábban emlegetett, egész rendszer időfejlődését leíró Neumann egyenletből koncepcionálisan olyan módon lehet eljutni a Lindblad egyenlethez, hogy miután mi csak egy alrendszer időfejlődését akarjuk leírni, parciális trace metódussal kitraceljük a külső rendszer szabadsági fokait, ezáltal megkapva a redukált sűrűségoperátort és ennek dinamikáját az általunk vizsgált rendszerre [13].

Klaszter közelítéssel kiterjesztett Lindblad eljárás

Lindblad egyenlet levezetésénél alkalmazott közelítések azonban nem minden esetben megfelelőek. Például, ha a vizsgált rendszer erősen kölcsönhat néhány, diszkrét energiaszintekkel rendelkező kvantum objektummal, akkor memória effektusok léphetnek fel illetve ha a rendszer dinamikája jelentős mértékben függ a kölcsönhatási Hamiltonian paramétereitől. A ponthibák elektronspinje, illetve az őket körülvevő magspinek által megvalósított kvantum node-ok esetén ez az eset áll elő. Amint az

1.1 ábra jól illusztrálja, a node-ok és környezetük alig választható külön. Ezért a Lindblad egyenlet nem alkalmas a rendszer dinamikájának a leírásra.

A témavezetőm egy korábbi fejlesztése során a Lindblad mozgásegyenletek és egy alkalmas klaszter közelítés házasításaként létrehozott módszer viszont már egy jobb közelítését adja a ponthiba kvantum bitek dinamikájának.[14] Fontos megemlíteni, hogy a Lindblad mozgásegyenletek használata ellenére ez a módszer egy a Markovi dinamikán túlmutató közelítést jelent. Illusztrációként 2.2 ábrán ezen módszer által vezérelt időfejlődés eredménye látható.



2.2. ábra. Csatolt Lindblad-egyenlet által vezérelt időfejlődés lecsengésének illusztrálása, N=8 magspin esetén, $H_{o,i} = S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+$ Hamilton-operátor mellett. A jobb oldali ábrán a 4 legerősebben kölcsönható magspin időfejlődése látható. Látszik emellett az exponenciális lecsengés is, melyre illesztett függvény: $(0.33887974 \cdot e^{-0.0012077t} + 0.14613985)$

A magspinek a környezet szerepét töltötték be a szimulációban és ők indukálták a központi elektronspin részben koherens dinamikáját. Környezeti kölcsönhatások nélkül a központi elektron spin S_z várhatóértéke időben változatlan maradt volna. Jól látható, hogy a szimulált időfejlődés nem konstans, illetve a kezdeti állapot lecsengése jóval komplexebb mint egy egyszerű Markovi exponenciális lecsengés. Ez a kiterjesztett, csatolt Lindblad módszer a dolgozatban tárgyalt fejlesztés ötletét adta, viszont a célom az volt, hogy a közelítés hiányosságait és hibáit felismerve egy jobb szimulációs módszert hozzak létre. A numerikus szimulációk során a kiterjesztett Lindbadian módszer által kapott időfejlődést referenciaként fogom használni.

2.9. Elméleti háttér összegzése

A fentebb leírt információk tehát a következő módon kapcsolódnak munkámhoz és egymáshoz. Az állapotvektorokon alapuló időfejlődés kiterjesztése a sűrűségmátrix formalizmus, amellyel összetett rendszerek jól kezelhetőek, azonban az összetett rendszerekből gyakran szükség van adott részrendszerre vonatkozó információkra,

melyet a parciális trace módszerrel lehet megkapni. A kiterjesztett Lindblad-egyenlet szintén alkalmas nyitott rendszerek időfejlődésének leírására. A következőkben ezekre az elméleti alapokra építkezem tovább.

3. fejezet

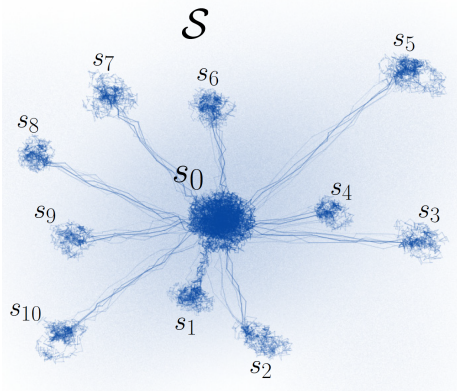
Kutatási eredmények I. - Elméleti megfontolások

Ebben fejezetben a kutatómunkám során megvalósított modellfejlesztés eredményeit és a kapcsolodódó analitikus számításokat ismertetem. Munkám során egy klaszter közelítésen alapuló módszert dolgoztam ki sok spin rendszerek időfejlődésének modellezésére. Megalkottam egy összegszabályt, mely meghatározza általános formában a sor tagjainak együtthatóit és a sor alkalmazása kapcsán belátok bizonyos megmaradási tételeket és szimmetriákat. Ezek megértése mind szükséges ahhoz, hogy az ezeken alapuló numerikus implementáció eredményeit érthessük és értékelhessük.

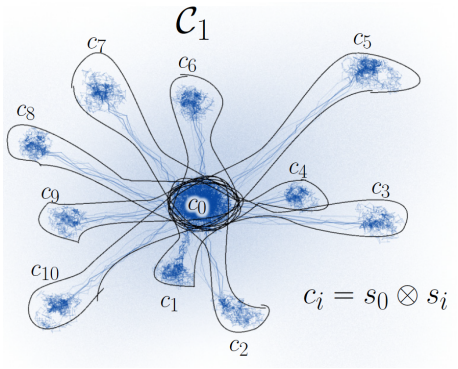
3.1. Fejlesztett modell bevezetése és ismertetése

Munkám során fő célom egy olyan módszer megalkotása volt, mely segítségével sok spin rendszerekben egy kitüntetett, központi spin időfejlődése közelíthető. Ezt egy olyan eljárással valósítottam meg, mely során a kitüntetett spin környezetében található spineket (melyekere később külső spin/magspin címen hivatkozom majd) különböző számú magspineket tartalmazó alrendszerekre osztottam, majd meghatároztam ezen alrendszerek járulékát a centrálspin sűrűségmátrixának időfejlődéséhez és felösszegeztem ezeket. Adott rendű alrendszerek halmazait klasztereknek nevezem, a későbbiekben erre rendszeresen hivatkozni fogok.

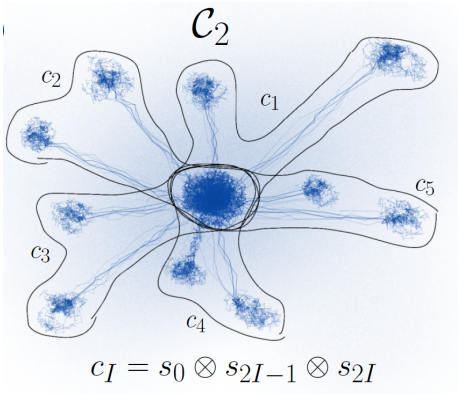
Egy ilyen általános sok spin rendszer, valamint ebben az első és másodrendű alrendszerek láthatók az 3.1 ábrán.



(a) Sok spin rendszer



(b) Elsőrendű klaszter



(c) Másodrendű klaszter

3.1. ábra. Általános sok spin rendszer és az ebben képzett első és másodrendű klaszterek vizualizációja.

Fontos eleme az ilyen módon megvalosított közelítésnek, hogy hogyan alakulnak a Hamilton-operátorok az egyes alrendszerekben. Ismert, hogy ha egy N darab $S = 1/2$ spinből álló sok spin rendszert vizsgálunk, ennek állapottere 2^N dimenzós, ilyen módon a Hamilton-operátor dimenziója $2^N \times 2^N$, amely az alábbi alakban írható fel párkölcsöntatásokat feltételezve,

$$H = H_0 + \sum_{i=1}^{N} (H_i + H_{0,i}) + \sum_{i=1,j<i}^{N} H_{i,j}, \tag{3.1}$$

ahol H_0 a központi spin Hamilton operátora, H_i az i-ik magspin Hamilton operátora, $H_{0,i}$ a központi spin és az i-ik magspin kölcsönhatását leíró Hamilton operátor, és $H_{i,j}$ az i-ik és a j-ik magspinek között fellépő kölcsönhatás Hamilton operátora. Az utóbbi tag a vizsgálni kívánt magspin környezeti spinekből álló rendszerek esetén elhanyagolható a többi taghoz képest.

Ha az alrendszereket vizsgáljuk, akkor az M magspint és a centrálspint tartalmazó M-edrendű alrendszerek Hamilton operátorai a következő alakban írhatók fel:

$$H^M_{\{i_1,..i_M\}} = H_0 + \sum_{i_n \in \{i_1,..i_M\}} (H_{i_n} + H_{0,i_n}) \tag{3.2}$$

ahol i_n-ek a magspineket indexelik, a Hamilton-operátorok alsó indexeiben található i_n-ek azon alrendszerben található magspinek indexeit jelentik, melyre a Hamilton-operátor vonatkozik. A szummázás a megfelelő rendig a kijelölt módon folytatható. Példaként a nullad, első és másod rendre:

- Nulladrend:
$$H^0 = H_0 \tag{3.3}$$

- Elsőrend:
$$H_i^1 = H_0 + H_i + H_{0,i}, \quad i \in \{1, ..., N\} \tag{3.4}$$

- Másodrend:
$$H_{i,j}^2 = H_0 + H_i + H_j + H_{0,i} + H_{0,j}, \quad i, j \in \{1, ..., N\}, \quad i \neq j \tag{3.5}$$

Az időfejlődés meghatározásánál első lépésben az alrendszerek dt időlépés alatti fejlődését a Liouville von Neumann egyenlet segítségével határozzuk meg,

$$d\rho_{(0,i_1,...,i_M)} = -\frac{i}{\hbar}[H^M_{\{i_1,...,i_M\}}, \rho_{(0,i_1,...,i_M)}]dt, \tag{3.6}$$

ahol $\rho_{(0,i_1,...,i_M)}$ az M-ed rendű klaszter $\{i_1, ..., i_M\}$ magspinekhez tartozó alrendszerének $2^{M+1} \times 2^{M+1}$ sűrűség mátrixa. A klaszter közelítésben a dt időfejlődés során az alrendszerek központi spinjei eltérő módon fejlődnek az eltérő Hamilton operátorok miatt. A valóságban azonban a magspinek hatása egyszerre jelentkezik a központi spinen. Ezt orvosolandó, a központi spin redukált sűrűség mátrixának a megváltozását úgy határozzuk meg, hogy az összes alrendszerben tapasztalt redukált sűrűség mátrixok megváltozását (a továbiakban: járulék) egy megfelelő összegszabály segítségével felösszegezzük.

A parciális tracet a centrális spinre vonatkozóan, az alábbi módon kell venni:

$$d\rho^M_{(0,i_1,..i_M)} = \mathrm{Tr}_{(i_1,i_2,..,i_M)}\, d\rho_{(0,i_1,..i_M)}, \tag{3.7}$$

ahol $d\rho^M_{(0,i_1,..i_M)}$ az adott M rendű klaszter $\{i_1, ..., i_M\}$ magspinekhez tartozó alrendszer járuléka a redukált sűrűségmátrix időfejlődéséhez, azaz $\rho^M_{(0,i_1,..i_M)}$ sűrűségmátrix megváltozása dt idő alatt. A jelölésben látható módon az adott klaszterhez tartózó 2×2-es redukált sűrűságmátrixot csak az alrendszer elemszámát jellemző felső index különbözteti meg a teljes alrendszerre vonatkozó mátrixtól, ilyen módon törekedve arra, hogy egyértelműen azonosíthatók legyenek a mátrixok. $d\rho^M_{(0,i_1,..i_M)}$ mátrixokat ezután egy általam defiált összegszabály szerint lehet összeadni, melyet később ismertetek.

A központi spin dt időlépés alatti fejlődése tehát egy felösszegzett $d\rho_{tot}$ sűrűségmátrix szerint valósul meg. Ahhoz, hogy a szimulációban a dt időfejlődést követően to-

vább tudjunk haladni, az alrendszerek sűrűségmátrixait „szinkronizálni" kell. Ez azt jelenti, hogy a sűrűségmátrixokat olyan módon kell módosítani (pl: unitér transzformációk segítségével), hogy az összes alrendszer központi spinjének redukált sűrűség mátrix diagonálisa egyezzen meg, és az összegszabály által meghatározott változást mutassa. Ily módon egy effektív csatolást valósítunk meg a klaszterek és az alrendszerek közt. A szinkronizációt követően a rendszer egy újabb *dt* időlépés segítségével tovább fejleszthető. Az algoritmust iterálva a sok spin rendszer dinamikájának egy közelítő leírását kapjuk.

Összegezve, ahhoz hogy a bevezetetésre kerülő módszer használható legyen, bizonyos közelítéseket kell tenni, illetve feltételeket szabni. A centrálspin illetve környezete által alkotott sok spin rendszer dinamikájának a leírására három fő közelítést vezetek be:

- *Központi spin közelítés.* Felteszem, hogy a környezetet alkotó kvantumos objektumok egy központi kvantum objektummal (spinnel) hatnak kölcsön párkölcsönhatásokon keresztül és a környezeti spinek közti kölcsönhatást elhanyagolom .

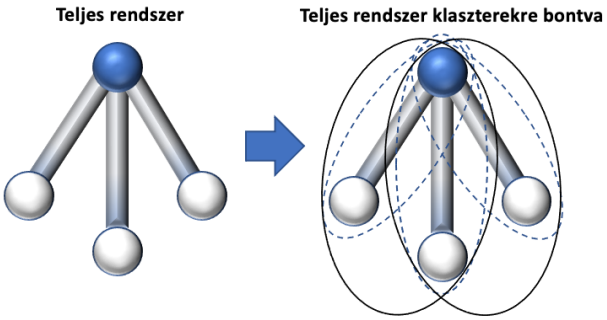
- *Klaszter közelítés.* A rendszer idefejlődése során, a központi spin sűrűségmátrixának a változását egy klaszter kifejtésen keresztül kisebb alrendszerekben tapasztalt sűrűségmátrix változások összegeként írom fel.

- *Alrendszerek dinamikájának csatolása.* A klaszter közelítésben definiált kis alrendszerek dinamikáját összecsatolom, olyan módon hogy a központi spin sűrűségmátrixának diagonálisa megegyezik minden alrendszerben a teljes időfejlődés során. A csatolt rendszer dinamikája a sok spin rendszer dinamikájának egy közelítését adja.

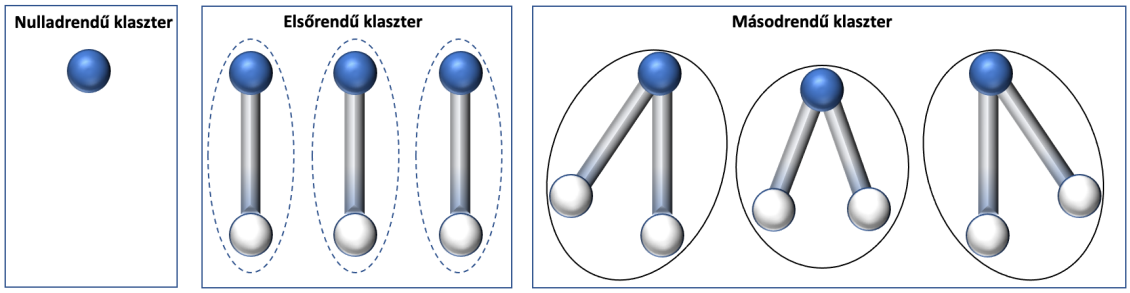
3.2. Klaszter közelítésekről általánosan

Ismert, hogy a sok spinből álló rendszerek Hilbert-tere, a korábban bevezetett állapotterek tenzoriális szorzataiból való előállítás miatt nagyon gyorsan elbonyolódik, rendkívül magas dimenziószámúvá válik.

Ennek folyományaként az ilyen rendszerek időfejlődésének egzakt szimulációja bizonyos spin szám felett a számítási kapacitás által meghatározott korlátokba ütközik. Ezt kiküszöbölendő, célszerű közelítési módszereket megalkotni, melyek lehetővé teszik az időfejlődés szimulálását. Ilyen közelítésre alkalmasak például az úgynevezett klaszter korrelációs közelítések[10] (CCE - Claster Correlation Expansion), melyek használhatók arra, hogy egy vizsgált spin időfejlődését közelítsük vele abban az esetben, ha ez a spin nagy számú egyéb spinnel áll kölcsönhatásban. Ezen közelítések



3.2. ábra. Adott spin rendszer klaszterezése, látható, hogy különböző elemszámú alrendszerekre osztom fel a rendszert, ilyen módon n rendű alrendszerekben mindig benne lesznek $n-m, \quad (m \in \{1,2,..,n\})$ rendű alrendszerek is.



3.3. ábra. Az alrendszerek felépítése, adott elemszámból álló alrendszerek tartoznak a közelítés megfelelő rendjéhez.

lényege abban áll, hogy a sok spin rendszert felosztjuk különböző alrendszerekre és ezeknek hatásait összegezzük fel. Kutatásom során olyan rendszerekre fejlesztettem egy sorfejtési eljárást, melyek esetén egy kitüntetett, úgynevezett centrális spin van, ennek időfejlődésére vagyok kíváncsi és ezt veszi körbe nagy számú külső magspin. A fő gondolatmenetet a 3.2 ábra szemlélteti, ahol fehér golyókkal jelöltem a magspineket, kék golyóval pedig a centrális spint, az egyes klaszterek és a bennük található alrendszerek különböző rendekben pedig a 3.3 ábrán láthatók.

Alaposabb utánagondolással az ilyen módon való sorfejtés hatékonysága könnyedén látható. Miután m rendű alrendszer $m+1$ db spint tartalmaz, a hozzá tartozó sűrűségoperátorok $2^{m+1} \times 2^{m+1}$-es mátrix-szal reprezentálhatóak. A teljes rendszert leíró Hilbert-Schmidt tér a klaszterek Hilbert-Schmidt tereiből az alábbi módon adódik

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{m=0}^{N} \mathcal{H}^m, \tag{3.8}$$

ahol $\mathcal{H}^m$ jelöli az m-edrendű klaszterek Hilbert-Schmidt tereit, N pedig maximális rendű klaszter rendje, azaz a rendszer magspinjeinek száma. $\mathcal{H}^m$ dimenziója $C \cdot 2^{m+1}$, ahol $C = \binom{N}{i}$. Miután a közelítés során az időfejlődéseket külön-külön alrendszerekben határozzuk meg, majd adjuk össze, ilyen módon látható, hogy ha egy tetszőleges N magspinből álló rendszert M-ed rendű sorba fejtünk, akkor ahelyett hogy

$2^{N+1} \times 2^{N+1}$ dimenziós operátorokkal kellene dolgozni, az alábbi lesz a Hilbert-tér

$$\bigoplus_{m=0}^{M} \left[\binom{N}{m} \bigotimes_{j=0}^{m} \mathcal{H}_j \right], \tag{3.9}$$

ahol N a magspinek száma, M a sorfejtés rendje, m a futóindex, ez indexeli a klaszterek rendjét, $\mathcal{H}^j$ pedig az adott j-edrendű alrendszer Hilbert-Schmidt tere. Az így meghatározandó mátrixelemek száma:

$$\sum_{0}^{M} \binom{N}{m} (2^{m+1} \times 2^{m+1}) \tag{3.10}$$

Látható, hogy például egy 10 magspinből álló rendszer ötödrendű sora esetén összesen 320248 elemet kell meghatározni minden időlépésben (hiszen az ötödrendű sor öt magspinből álló klaszterekig megy el, de a centrális spinnel együtt ezen klaszterek elemszáma hat), míg az egzakt esetben 4194304 darabot. Az is látható, hogy ha M=N, akkor a kiszámolandó elemek száma egyezik, amit várunk is, hiszen követeljük hogy N magspinből álló rendszert N-ed rendű sorba fejtve az egzakt megoldást kapjuk. (A polinomok Taylor -sorba fejtéséhez vagy az N ponttöltésből álló rendszer multipól sorfejtéséhez hasonló az elgondolás.)

3.3. A sort definiáló összegszabály

Az általunk fejlesztett módszer egy kulcs pontja annak meghatározása, hogy a különböző alrendszerek járulékait milyen módon kell felösszegezni, hogy az időfejledés adott rendben leghűbben tükrözze az egzakt esetet. Fontos, hogy megköveteljük a módszertől, hogy N magspin esetén az N-edrendű sor visszaadja az egzakt időfejlődést. Az alább definiált formula mögött fontos koncepció, hogy 1,2,3,...,M rendű klaszter járulékait úgy határozzuk meg, hogy az egyes alrendszerek járulékát olyan módon adjuk hozzá a centrális spin redukált sűrűségmátrixához, hogy az adott alrendszerben bennefoglalt kisebbrendű alrendszerek járulékait minden rendben kivonjuk a magasabb rendű alrendszer járulékából, hiszen azt már figyelembe vettük az adott alacsonyabb rendben. Erre szemléltetésül álljon alább kettő példa, egy 3 magspinből és egy centrális spinből álló rendszerre.

A különböző rendű sorok az alábbiak:

- 0. rendű sor:

$$d\rho_{tot} = d\rho^0 \tag{3.11}$$

- 1. rendű sor:

$$d\rho_{tot} = d\rho^0 + (d\rho_1^1 - d\rho^0) + (d\rho_2^1 - d\rho^0) + (d\rho_3^1 - d\rho^0) \tag{3.12}$$

- 2. rendű sor:

$$\begin{aligned} d\rho_{tot} &= d\rho^0 + (d\rho_1^1 - d\rho^0) + (d\rho_2^1 - d\rho^0) + (d\rho_3^1 - d\rho^0) \\ &+ [d\rho_{1,2}^2 - (d\rho_1^1 - d\rho^0) - (d\rho_2^1 - d\rho^0) - d\rho^0] \\ &+ [d\rho_{1,3}^2 - (d\rho_1^1 - d\rho^0) - (d\rho_3^1 - d\rho^0) - d\rho^0] \\ &+ [d\rho_{2,3}^2 - (d\rho_2^1 - d\rho^0) - (d\rho_3^1 - d\rho^0) - d\rho^0] \end{aligned} \tag{3.13}$$

  tovább alakítva

$$\begin{aligned} d\rho_{tot} &= -2d\rho^0 - (d\rho_1^1 - d\rho^0) - (d\rho_2^1 - d\rho^0) - (d\rho_3^1 - d\rho^0) \\ &+ d\rho_{1,2}^2 + d\rho_{1,3}^2 + d\rho_{2,3}^2 = \\ &d\rho^0 - (d\rho_1^1 + d\rho_2^1 + d\rho_3^1) + (d\rho_{1,2}^2 + d\rho_{1,3}^2 + d\rho_{2,3}^2) \end{aligned} \tag{3.14}$$

N magspinre ezeket általánosítva pedig:

- 1. rend:

$$d\rho_{tot} = (1 - N) \cdot d\rho^0 + \sum_{i=1}^{N} d\rho_i^1 \tag{3.15}$$

- 2. rend:

$$d\rho_{tot} = (1 - \binom{N}{2})d\rho^0 + (2 - N)\sum_{i=1}^{N} d\rho_i^1 + \sum_{i=1,j=2,i<j}^{N} d\rho_{i,j}^2 \tag{3.16}$$

Az is látható, hogy kettő magspin esetére a másodrendű sort felírva ennek alakja az alábbi lesz:

$$\begin{aligned} d\rho_{tot} &= d\rho^0 + (d\rho_1^1 - d\rho^0) + (d\rho_2^1 - d\rho^0) + \\ &[d\rho_{1,2}^2 - (d\rho_1^1 - d\rho^0) - (d\rho_2^1 - d\rho^0) - d\rho^0] \end{aligned} \tag{3.17}$$

Amiben a lehetséges összevonásokat elvégezve

$$d\rho_{tot} = d\rho_{1,2}^2. \tag{3.18}$$

Azaz az egzakt esetet kapjuk vissza.

Ezek figyelembe vételével, Q magspin esetén az N rendű sor az alábbiak szerint áll elő

$$C_n = \frac{\sum_{N=1}^{Q}\binom{Q}{N}\sum_{m=n}^{N}\binom{N}{m}\left[\sum_{i=n}^{m}(-1)^{(N-m+i-n)}\binom{m}{i}\left[\prod_{j=n}^{i}\binom{j}{j-1}\right]\right]}{\binom{Q}{n}}, \tag{3.19}$$

$$d\rho_{tot} = \sum_{n=0}^{N} C_n d\rho^n. \tag{3.20}$$

Ahol az indexekre az alábbiak vonatkoznak:

$$\begin{aligned} &Q, N, m, i, j \in \mathbb{Z} \\ &N \in [0, Q] \\ &m \in [n, N] \\ &n \in [0, N] \end{aligned} \tag{3.21}$$

A képletet pedig olyan módon kell értelmezni, hogy Q magspin esetén a sor N-edrendű tagjának m-edrendű al-tagjában az n-edrendű $d\rho^n$ járulékok ilyen együtthatóval fordulnak elő. A képlet végén szereplő $d\rho^n$ azért nem kapott alsó indexet, mert az hogy egy adott járulék milyen együtthatóval fordul elő, csak a járulék rendjétől függ, attól nem, hogy melyik n-edrendű alrendszerhez tartozik.

Egy átláthatóbb átírása ennek a formulának:

Mintegy ellenőrzésképpen vizsgáljuk meg, hogy egy három magspinből álló rendszer esetén a másodrendű sor hogyan áll elő, immár a 3.15 és 3.16 képletekből származtatva. Ekkor Q=3, N=2, a tagok pedig az alábbiakban részletezett számolásokkal határozhatók meg:

- 0. rendű tagok:
  n=0, N=0, m=0

$$\binom{3}{0} \cdot \binom{0}{0} \cdot (-1)^0 \binom{0}{0} \cdot 1 = 1 \tag{3.22}$$

  n=0, N=1, m=0,1

$$\binom{3}{1} \cdot \left[\binom{1}{0} (-1)^1 \binom{1}{0} \cdot 1 + \binom{1}{1} (-1)^0 \binom{1}{0} \cdot 1 + \binom{1}{1} (-1)^1 \binom{1}{1} \cdot 1 \right] = -3 \tag{3.23}$$

  n=0, N=2, m=0,1,2

$$\begin{aligned} &\binom{3}{2} \cdot \left[\binom{2}{0} (-1)^2 \binom{0}{0} \cdot 1 + \binom{2}{1} (-1)^1 \binom{1}{0} \cdot 1 + \binom{2}{1} (-1)^2 \binom{1}{1} \cdot 1 \right] + \\ &\binom{3}{2} \cdot \left[\binom{2}{2} (-1)^0 \binom{2}{0} \cdot 1 + \binom{2}{2} (-1)^1 \binom{2}{1} + \binom{2}{2} (-1)^2 \binom{2}{2} \cdot \binom{2}{1} \right] = 3 \end{aligned} \tag{3.24}$$

  Tehát összesen 1-3+3=1 a nulladrendű tag együtthatója.

- 1. rendű tagok
  n=1, N=1, m=1

$$\frac{1}{3} \cdot \binom{3}{1} \cdot \binom{1}{1} (-1)^0 \binom{1}{1} \cdot 1 = 1 \tag{3.25}$$

n=1, N=2, m=1,2

$$\frac{1}{3}\binom{3}{2}\left[\binom{2}{1}(-1)^1\binom{1}{1}\cdot 1+\binom{2}{2}(-1)^0\binom{2}{1}\cdot 1+\binom{2}{2}(-1)^1\binom{2}{2}\cdot\binom{2}{1}\right]=-2 \tag{3.26}$$

Tehát összesen 1-2=-1 minden elsőrendű tag együtthatója.

- 2. rendű tagok
  n=2, N=2, m=2

$$\frac{1}{3}\cdot\binom{3}{2}\cdot\binom{2}{2}\cdot(-1)^0\binom{2}{2}\cdot 1=1 \tag{3.27}$$

  Azaz összesen egy darab van minden másodrendű tagból.

Mint látható, visszakaptuk a 3.14 egyenletben már felírt sort az n=0,n=1 és n=2 tagok összegeként.

3.4. Megmaradási tételek a sorfejtésben

3.4.1. S_z operátor várható értékének megmaradása

Fontos, hogy a szimulációk mellett pusztán elméleti megfontolásokkal is lényegi megállapításokat tegyünk a bevezetett sorfejtés bizonyos tulajdonságaira vonatkozóan, ilyen módon lehetőséget adva magunknak az önellenőrzésre. A következőkben megmutatom, hogy egy centrális spinből és N külső magspinből álló zárt rendszer esetén a spin z irányú vetületének állandósága a sorfejtésben elméleti meggondolásokból is következik, amennyiben az elsőrendű tagok esetén a párkölcsönhatást az alábbi Hamilton-operátor definiálja

$$H_i^1 = H_0 \otimes I_i + I_0 \otimes H_i + S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+. \tag{3.28}$$

Azért foglalkozom külön ezzel az operátorral, mert ezt a szimulációk során rendszeresen használom, illetve az erre a példára levezetett eredmények szemléletesek, ezeket később pedig általánosítom.

Ismert, hogy egy N magspinből álló rendszer sorfejtése elsőrendben 3.7 és 3.15 alapján az alábbi

$$d\rho_{tot} = (1-N)d\rho^0 + \sum_i^N \mathrm{Tr}_i\, d\rho_i^0 \tag{3.29}$$

ahol a kétspin alrendszerek sűrűségmátrixaiból parciális trace módszerrel előállítható minden pár esetén a centrális spin és a magspin sűrűségmátrixa, illetve annak megváltozása dt idő alatt. Iyen módon a kétspin rendszerek sűrűségmátrixaiból kitracelt

centrális illetve magspin sűrűségmátrixokra az alábbi jelöléseket vezetem be,

$$d\rho^0_{0,i} := \mathrm{Tr}_i\, d\rho_{0,i}; \qquad d\rho^i_{0,i} := \mathrm{Tr}_0\, d\rho_{0,i}, \tag{3.30}$$

ahol a korábbiaktól eltérően a felső index most nem az alrendszer rendjét jelzi, hanem hogy melyik spin parciális trace-ét tekintjük. (A fenti 3.33 példákban tehát azt látjuk, hogy egy 0 és egy i indexű 2 spint tartalmazó rendszert kitracelve a 0 indexű spin redukált sűrűségmátrixát kapom, azaz a jobb alsó index jelöli az alrendszer által tartalmazott spineket, a felső index pedig hogy ebből melyiket traceltem ki.) Ezeket visszaírva a várható érték fentebb adott képletében az alábbi formula adódik az S_z várható értékének megváltozására:

$$d\langle S_z\rangle = \mathrm{Tr}\left[S_z\left((1-N)d\rho_0 + \sum_i d\rho^0_{0,i} + \sum_i d\rho^i_{0,i}\right)\right], \tag{3.31}$$

Az állítás igazolásához szükség lesz még az időfejlődést megadó alakra is, ez

$$d\rho_0 = \frac{-i}{\hbar}[H_0, \rho_0]dt, \tag{3.32}$$

a nulladrendű tagra és

$$d\rho_{0,i} = \frac{-i}{\hbar}[H_{0,i}, \rho_{0,i}]dt, \tag{3.33}$$

az elsőrendű tagokra. Visszahelyettesítve az operátorokat

$$d\langle S_z\rangle = \mathrm{Tr}\left[S_z\left((1-N)\frac{-i}{\hbar}[H_0,\rho_0]dt + \sum_{i=1}\mathrm{Tr}_i(\frac{-i}{\hbar}[H_{0,i},\rho_{0,i}]dt)\right)\right], \tag{3.34}$$

Ebben kihasználva, a trace ciklicitására vonatkozó alábbi összefüggést:

$$\mathrm{Tr}(A\cdot B\cdot C) = \mathrm{Tr}(C\cdot A\cdot B), \tag{3.35}$$

adódik

$$\mathrm{Tr}(S_z[H,\rho]) = \mathrm{Tr}(S_z\cdot H\cdot\rho) - \mathrm{Tr}(S_z\cdot\rho\cdot H), \tag{3.36}$$

Ezek alapján, valamint kihasználva, hogy H_0 és H_i operátorok kommutálnak ρ_0 és ρ_i-vel (ezek egy-egy kubit 2×2-es mátrixai), a fenti kifejezés a következőre egyszerűsödik:

$$\begin{aligned} d\langle S_z\rangle = &\mathrm{Tr}\left[\sum_i S_z\,\mathrm{Tr}_i([S_+\otimes S_- + S_-\otimes S_+, d\rho_{0,i}]dt)\right] + \\ &\mathrm{Tr}\left[\sum_i S_z\,\mathrm{Tr}_0([S_+\otimes S_- + S_-\otimes S_+, d\rho_{0,i}]dt)\right] \end{aligned} \tag{3.37}$$

Mivel ebben már csak ismert S_+, S_- operátorok és azok szorzatai szerepelnek, a

számolás további részét ezek mátrix alakjait használva egyszerűen el lehet végezni. Innen már triviálisan belátható, hogy a

$$\mathrm{Tr}_i([S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+, d\rho_{0,i}]) + \mathrm{Tr}_0([S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+, d\rho_{0,i}]) \tag{3.38}$$

mátrixok diagonális elemei egyenlőek, melyre S_z operátort hattatva a diagonális elemek egymás -1 szeresei lesznek, a trace pedig 0. Ezzel pedig a várható érték megváltozásának definiciójából következően a kezdeti feltevést igazoltuk.

Innen már könnyedén látható, hogy magasabb rendek esetén, a több magspint tartalmazó klaszterekben ható operátorok alakja a fentebb definiáltaktól annyibban fog csak különbözni, hogy a megfelelő egységoperátorral való tenzoriális szorzatok megjelennek és az összeg több tagú lesz. A nem kölcsönhatást leíró tagok járuléka az $\langle S_z \rangle$ megváltozásához a megfelelő parciális tracek után az előbbiekhez hasonló módon ismét nulla lesz, a kölcsönhatási tagok pedig a parciális tracek hatására a fentebb már látott 4×4 dimenziós mátrixokkal reprezentálható operátorokra redukálódnak. A 3.19, 3.20 képletbe az ilyen módon adódó operátorokat visszahelyettesítve, az első 6 rendre a behelyettesítést elvégezve a megmaradás minden vizsgált rendben teljesül, melyet a szimulációk eredményei is igazolnak.

3.4.2. Energia megmaradás elsőrendben

Fontos tárgyalni az energia megmaradásának teljesülését is a sorfejtés különböző rendjeiben. A következőkben egy olyan rendszer elsőrendű sorfejtésében fogom az energia megmaradását igazolni, melyben a kétspin klaszterek Hamilton-operátora az alábbi:

$$H_{0,i} = A_i S_Z \otimes I + B_i S_x \otimes S_z \tag{3.39}$$

Elsőrendű tag esetén a képlet a már korábban definiált, alábbi formában áll elő

$$d\rho_{tot} = (1 - N) d\rho_0 + \sum_i \mathrm{Tr}_i \, d\rho_{0,i}, \tag{3.40}$$

Az átláthatóság kedvéért vezessük be az alábbi jelöléseket

$$A_i S_Z \otimes I := A_{0,i}, \tag{3.41}$$

$$B_i S_x \otimes S_z := B_{0,i}. \tag{3.42}$$

Ilyen módon egy-egy kétspin alrendszer időfejlődése az alábbi alakban áll elő:

$$d\rho_{0,i} = \frac{-i}{\hbar}[H_{0,i}, \rho]dt = \frac{-i}{\hbar}[A_{0,i} + B_{0,i}, \rho]dt \tag{3.43}$$

Ezt kihasználva az alábbi egyenlet adódik az energia várható érték változására az elsőrendű tagok esetén:

$$d\langle H^1\rangle = \sum_i \mathrm{Tr}(H_{0,i} d\rho_{0,i}) \tag{3.44}$$

A nulladrendű tagok járuléka az energiaváltozásban triviálisan 0, hiszen, ezek éppen egy zárt egy spinből álló rendszert írnak le. Ilyen módon az energia várható érték időbeli változását megadó egyenlet az alábbi:

$$d\langle H^1\rangle = \frac{-i}{\hbar}\sum_i \mathrm{Tr}[(A^2+B^2+A\cdot B+B\cdot A)\rho_{0,i}+(A+B)\rho_{0,i}(A+B)]dt \tag{3.45}$$

Kihasználva, hogy $\forall M, N \in diag(\mathbb{R}^n)$:

$$[M,N]=0 \tag{3.46}$$

és a fentebb definiált A, B mátrixokról könnyedén belátható, hogy

$$A, A^2, B^2 \in diag(\mathbb{R}^4), \tag{3.47}$$

$$A\cdot B = -B\cdot A, \tag{3.48}$$

illetve

$$(A+B)^2 = A^2+B^2. \tag{3.49}$$

Ezek használatával egyenletünk a következő formára egyszerűsödik tovább a trace ciklicitását használva:

$$d\langle H^1\rangle = \frac{-i}{\hbar}\mathrm{Tr}[(A^2+B^2),\rho_{0,i}] + \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}[(B+A)^2,\rho_{0,i}]dt = 0 \tag{3.50}$$

Éppen ezt szerettük volna belátni.

3.4.3. Általános operátor megmaradás feltételei elsőrendben

Amennyiben az első esetben már használt, alább látható kölcsönhatási operátort alkalmazzuk:

$$H_{0,i} = S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+ \tag{3.51}$$

az elsőrendű tagokban fellépő két spin rendszerekben, általános megfontolásokat tehetünk arra vonatkozóan, hogy mik azok az operátorok, melyek az időfejlődés során ebben a rendben megmaradnak. Ahhoz, hogy ezt megtehessük, ismét írjuk fel egy adott operátor időbeli változásának várható értékét. Azt már korabban belátuk, hogy a nem kölcsönhatási, hanem adott centrális/magspin időfejlődést megadó Hamiltonok a megmaradási tételeket triviálisan teljesítik, ezért azokkal a továbbiakban nem foglalkozunk. A várható érték időfejlődésének alakulása a kölcsönhatási

Hamilton járulékából

$$d\langle O\rangle = \mathrm{Tr}\left[O\sum_i(\mathrm{Tr}_i[H_{0,i},\rho_{0,i}] + \mathrm{Tr}_0[H_{0,i},\rho_{0,i}])dt\right]. \tag{3.52}$$

Miután S_+, S_- operátorokat reprezentáló mátrixokat ismerjük, mégpedig az alábbi alakban:

$$S_+ = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \qquad S_- = \begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{3.53}$$

A használt kölcsönhatási Hamilton mátrixreprezentációja könnyedén kiszámítható, rövid levezetés után az alábbi alakban áll elő:

$$H_{0,i} = \begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}, \tag{3.54}$$

Melynek kommutátorát véve egy tetszőleges $\rho_{0,i}$ operátorral a következő mátrix adódik

$$[H_{0,i},\rho_{(0,i)}] = \begin{pmatrix}0 & \rho_{(0,i)1,3} & \rho_{(0,i)1,2} & 0\\ \rho_{(0,i)3,1} & \rho_{(0,i)3,2} & \rho_{(0,i)3,3} & \rho_{(0,i)3,4}\\ \rho_{(0,i)2,1} & \rho_{(0,i)2,2} & \rho_{(0,i)2,3} & \rho_{(0,i)2,4}\\ 0 & \rho_{(0,i)4,3} & \rho_{(0,i)4,2} & 0\end{pmatrix}. \tag{3.55}$$

Ezt behelyettesítve a fenti 3.52 egyenletbe, kihasználva a parciális trace mátrixreprezentációra definiált hatását, a várható érték megváltozására mátrix alakban az alábbi formula adódik, ahol $\rho_{0,i}$ 0,i indexeit az átláthatóság miatt nem tüntetem fel, de az írt elemek mint $\rho_{0,i}$ elemei értendők.

$$d\langle O\rangle = \mathrm{Tr}\left[O\sum_i\left[\begin{pmatrix}-\rho_{3,2}+\rho_{2,3} & \rho_{2,4}-\rho_{1,3}\\ \rho_{3,1}+\rho_{4,2} & \rho_{3,2}-\rho_{2,3}\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\rho_{3,2}-\rho_{2,3} & \rho_{3,4}-\rho_{1,2}\\ \rho_{2,1}-\rho_{4,3} & -\rho_{3,2}+\rho_{2,3}\end{pmatrix}\right]dt\right] \tag{3.56}$$

Látható, hogy a kifejezésben fellépő mátrixok mind spurtalanok, tehát ennek a kifejezésnek a trace-e minden esetben 0 lesz, mikor az O operátor ezt a tulajdonságot megtartja. Általános ρ esetén a diagonális operátorok teljesítik ezt a feltételt, speciálisabb ρ esetén azonban bővíteni lehet a megmaradást teljesítő operatorok körét. Három fő esetet különböztethetünk meg.

1. ρ off-diagonális elemei nullák, ekkor bármilyen Hermitikus operátor megfelel, tehát:
$$\rho \in diag(\mathbb{R}^2) \to \forall O, \qquad O^\dagger = O \tag{3.57}$$

2. ρ off-diagonális elemei valósak, ekkor a megengedett operátorok alakja:
$$O = \begin{pmatrix}a & b\\ -b & c\end{pmatrix}, a, b, c \in \mathbb{C} \tag{3.58}$$

3. ρ off-diagonális elemei tisztán képzetesek, ekkor a lehetséges operátorok a következő alakban állhatnak elő:

$$O = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}, a, b, c \in \mathbb{C} \tag{3.59}$$

Fontos megjegyezni, hogy az említett három tulajdonság adott időpillanatban való fennállása nem jelenti azt, hogy ezek minden későbbi időpillanatban is fennállnak.

3.4.4. Egy speciális szimmetria másod és magasabb rendekben

A következőkben levezetem azt a szemléletesen is elgondolható állítást, hogy amennyiben a sűrűségmátrix nem tartalmaz korrelációs tagokat, szorzat alakban írható fel, akkor ha a magspinek között nincsen kölcsönhatás, az első rendnél magasabb rendű járulékok a sorfejtésekben mind nullák.

A másodrendű sorfejtés alakját megadó formula a 3.16 képlet szerint az alábbi N magspin esetére:

$$d\rho_{tot} = (1 - \binom{N}{2}) d\rho^0 + (2 - N) \sum_{i=1}^{N} d\rho_i^1 + \sum_{i=1, j=2, i<j}^{N} d\rho_{i,j}^2 \tag{3.60}$$

ahol a másodrendű tag időfejlődését megadó Hamilton operátor általános alakja a következő

$$\begin{aligned} H_{i,j} =& (H_0 \otimes I \otimes I) + (I \otimes H_i \otimes I) + (I \otimes I \otimes H_j) + \\ & (\overline{H_0} \otimes \overline{H_i} \otimes I) + (\overline{H_0} \otimes I \otimes \overline{H_j}), \end{aligned} \tag{3.61}$$

itt $\overline{H_0}, \overline{H_i}, \overline{H_j}$ tetszőleges, a kölcsönhatási tagokban megjelenő Hamilton-operátorok, H_0, H_i, H_j pedig a vizsgált alrendszer spinjeinek a Hamilton operátorai. Ezt beírva a Neumann egyenletbe, a központi spin időfejlődésére a másodrendű tagban adódik

$$\begin{aligned} d\rho_{i,j} =& \mathrm{Tr}_{i,j} \left(-\frac{i}{\hbar} [((H_0 \otimes I \otimes I) + (I \otimes H_i \otimes I) + (I \otimes I \otimes H_j)), \rho_{i,j}] \right) dt + \\ & \mathrm{Tr}_{i,j} \left(-\frac{i}{\hbar} [((\overline{H_0} \otimes \overline{H_i} \otimes I) + (\overline{H_0} \otimes I \otimes \overline{H_j})), \rho_{i,j}] \right) dt, \end{aligned} \tag{3.62}$$

azaz

$$\begin{aligned} d\rho_{i,j} =& \mathrm{Tr}_{i,j} \Bigg[-\frac{i}{\hbar} [(H_0 \otimes I \otimes I), \rho_{i,j}] - \frac{i}{\hbar} [(I \otimes H_i \otimes I), \rho_{i,j}] \\ & - \frac{i}{\hbar} [(I \otimes I \otimes H_j), \rho_{i,j}] - \frac{i}{\hbar} [(\overline{H_0} \otimes \overline{H_i} \otimes I), \rho_{i,j}] \\ & - \frac{i}{\hbar} [(\overline{H_0} \otimes I \otimes \overline{H_j}), \rho_{i,j}] \Bigg] dt, \end{aligned} \tag{3.63}$$

ahol az alábbi azonosságok fennállnak, mivel ρ szorzat alakú:

$$\mathrm{Tr}_{i,j}[(H_0 \otimes I \otimes I), \rho_{i,j}] = \mathrm{Tr}_i[(H_0 \otimes I), \rho_i] = [H_0, \rho_0] \tag{3.64}$$

$$\mathrm{Tr}_{i,j}[(I \otimes H_i \otimes I), \rho_{i,j}] = \mathrm{Tr}_i[(I \otimes H_i), \rho_i] \tag{3.65}$$

$$\mathrm{Tr}_{i,j}[(I \otimes I \otimes H_j), \rho_{i,j}] = \mathrm{Tr}_j[(I \otimes H_j), \rho_j] \tag{3.66}$$

$$\mathrm{Tr}_{i,j}[(\overline{H_0} \otimes \overline{H_i} \otimes I), \rho_{i,j}] = \mathrm{Tr}_i[(\overline{H_0} \otimes \overline{H_i}), \rho_i] \tag{3.67}$$

$$\mathrm{Tr}_{i,j}[(\overline{H_0} \otimes I \otimes \overline{H_j}), \rho_{i,j}] = \mathrm{Tr}_j[(\overline{H_0} \otimes \overline{H_j}), \rho_j] \tag{3.68}$$

Ezeket visszahelyettesítve a fent leírt 3.62 egyenletbe és kihasználva, hogy a nulla és elsőrendű tagok alakulása a 3.32, 3.33 egyenletek által definiált, a másodrendre vonatkozó tagok mind kiesnek és a fennmaradó tagok pedig éppen a 3.15 képlet által megadott elsőrendű sor tagjaival egyeznek meg, ilyen módon tehát visszakapjuk az elsőrendű sorfejtést. Ugyanezen megfontolások alapján látható az is, hogy tetszőleges egynél nagyobb rend esetén teljesül a fentebb leírt állítás. Nem bizonyítom, de belátható, hogy általánosan, ha n-rendűnél magasabb rendű kölcsönhatások nincsenek, akkor minden $n < m$ rendű tag járuléka 0 amennyiben nincs a rendszerben korreláció. Szintén fontos megjegyezni, hogy az időfejlődés a ρ szorzat alakját nem mindig tartja meg.

3.5. A közelítés optimalizációja

A közelítő módszer használata kapcsán joggal merül fel a kérdés, hogy adott rendszer esetén milyen rendben mekkora a pontossága a közelítésnek és – mind a hatékonyságot, mind a pontosságot szem előtt tartva – meddig érdemes elmenni a sorfejtésben. Ezen kérdések megválaszolására az alább ismertetett eljárást dolgoztam ki a sorfejtés oprimalizálására.

Elsőként szükséges valamilyen módon definiálni adott rendek járulékainak a nagyságát, hogy aztán meg tudjuk határozni, mi az a rend, melytől kezdve a tagok járuléka már elhanyagolható. Ezt olyan módon tesszük, hogy definiáljuk adott rendű tagok járulékát, melyet az alábbi képlet ad meg

$$\frac{1}{|t_1 - t_2|} \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_{i=1}^{m} d\rho^n_{(0,i_1,..i_n)}(t) - \sum_{i=1}^{p} d\rho^{n-1}_{(0,i_1,..i_{n-1})}(t) \right] dt = D\rho^n, \tag{3.69}$$

ahol m az n rendű alrendszerek, p pedig az $n-1$ rendű alrendszerek száma. A fenti kifejezés értékét a numerikus számítások során könnyedén meg lehet határozni az adott időlépések során kapott $d\rho$ értékekből.

Adott rendek járulékait vizsgálhatjuk rekurzívan, azaz az előző rendű taghoz viszonyítva, vagy pedig az egész sor összesített járulékának tükrében. Ilyen módon arányszámot kaphatunk a vizsgált tag járulékára vonatkozóan, amely megadja, hogy az hányadrésze az előtte lévő tag járulékának illetve az összes tag együttes járulékának. Az arányszámok az alábbiak szerint adódnak:

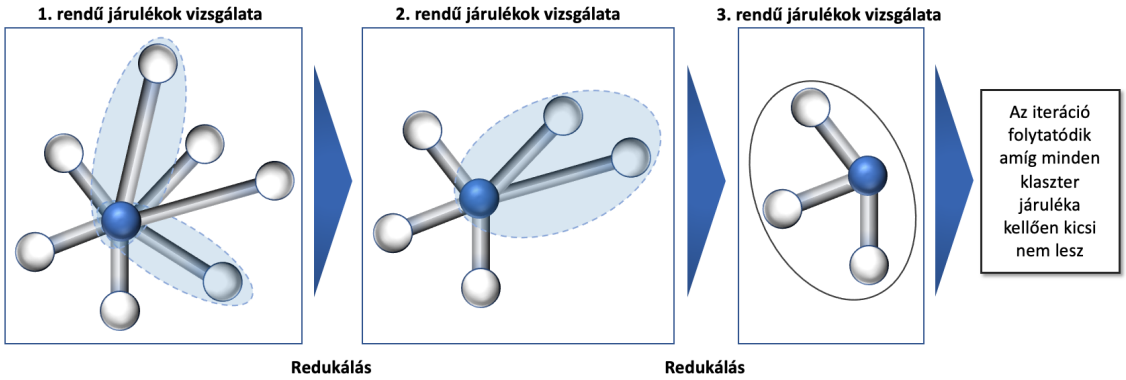
$$\frac{\int_{t_1}^{t_2}\left[\sum_{i=1}^{m} d\rho^{n}_{(0,i_1,..i_n)}(t)-\sum_{i=1}^{p} d\rho^{n-1}_{(0,i_1,..i_{n-1})}(t)\right]dt}{\int_{t_1}^{t_2}\left[\sum_{i=1}^{p} d\rho^{n-1}_{(0,i_1,..i_{n-1})}(t)-\sum_{i=1}^{q} d\rho^{n-2}_{(0,i_1,..i_{n-2})}(t)\right]dt}=R_{R;n,n-1} \tag{3.70}$$

$$\frac{\int_{t_1}^{t_2}\left[\sum_{i=1}^{m} d\rho^{n}_{(0,i_1,..i_n)}(t)-\sum_{i=1}^{p} d\rho^{n-1}_{(0,i_1,..i_{n-1})}(t)\right]dt}{\int_{t_1}^{t_2}\mathcal{S}_{n-1}(d\rho_i(t))dt}=R_{S;n,n-1}, \tag{3.71}$$

ahol $\mathcal{S}_{n-1}()$ azt jelenti, hogy az ennek az arumentumában lévő tagra alkalmazni kell a fentebb definiált összegszabályt $n-1$ indexig, q pedig az $n-2$ elemet tartalmazó alrendszerek száma. Itt a törtek számlálójában és nevezőjében is egy operátor áll, hiszen operátorokat szummáztunk illetve integráltunk. Az, hogy aztán ezen operátorokból milyen skalár mennyiséget csinálunk, melyek aránya ténylegesen számolható, a megoldandó probléma függvénye. Amennyiben megadjuk, hogy mekkora arányszámtól kezdődően hagyjuk el a következő tagokat, a fenti számításokat elvégezve iteratívan, minden egyes tag meghatározása után, a sorfejtésben megállhatunk a meghatározott arányszám elérésekor.

Elképzelhető, hogy nem egy relatív érték alapján szeretnénk határt szabni a pontosságnak, ebben az esetben a megoldás még egyszerűbb, mert adott rendű tag járulékát minden egyes rendben meghatározzuk, majd ezt összehasonlítva a kezdetben megadott, pontosságra vonatkozó feltétellel, ismét a kívánt érték elérése esetén a sorfejtésben megállhatunk.

Lehetőség van még a magspinek csoportosítására és különböző csoportok esetén különböző rendű sorfejtést elvégezni, amennyiben ez indokolt. Ilyen eset lehet, ha egy magspin halmaz jóval erősebb kölcsonhatásban van a centrálspinnel mint a többi rendszerben részt vevő magspin, ahogy ez például az NV centrum esetén tapasztalható. Azt, hogy a különböző csoportokban meddig menjünk el a sorfejtésben, szintén az adott rendű járulékok vizsgálatával tudjuk eldönteni. Intuitíven a folyamat úgy gondolható el, hogy első rendből elindulva vizsgáljuk minden elsőrendű alrendszer járulékát. Amelyik alrendszerhez tartozó járulék kellően kicsi, ott első rendben megállunk. Amelyhez tartozó járulék egy meghatározott érték felett van,



3.4. ábra. Optimalizáció lépései. Minden alrendszer járulékát vizsgáljuk adott rendben, majd a túl kis járulékot adókat (kék keretezéssel jelölt) elhagyjuk a következő rend számolásakor.

azokat megtartjuk, és immár csökentett számú magspinre végezzük el a következő iterációban a klaszterezést és az időlépést. Ennek megtörténte után a járulékokat ismét megvizsgáljuk és a folyamat ismétlődik. A 3.4 ábra a bemutatott gondolatmenet szemléltetésére szolgál. Ilyen módon a szimulációk pontossága és a szükséges számolási idő optimalizálható.

3.6. Elméleti eredmények rendszerezése és összegzése

Kutatásom elméleti részében tehát a klaszter közelítésben használt sorfejtés egy tetszőleges rendjében az együtthatókat definiáló képletet alkottam, majd ennek használatával megmutattam a spin z és az energia várható értékek megmaradását speciális rendszerekre. Ezen megmaradások kiemelten fontosak, hiszen korábban is léteztek már a dolgozatomban tárgyalthoz hasonló elven alapuló közelítő módszerek, azonban azok közül egyik sem teljesíti az említett megmaradási tételeket. Mindezek mellett levezettem egy speciális szimmetriát másod és magasabb rendekre, amely hasznos lehet bizonyos speciális rendszerek esetén, ahol szimmetria tárgyalt feltételei fennállnak. Végül pedig bevezettem egy módszert és a hozzá szükséges definiciókat, mellyel a sorfejtés optimalizálható.

4. fejezet

Kutatási eredmények II. - Numerikus implementáció

A következő fejezetben taglalom a korábban ismertetett elméleti modellfejlesztés numerikus implementációjának részleteit és értékelem az ezzel nyert eredményeket, az egzakt szimulációkkal és korábban fejlesztett egyéb módszerekkel összehasonlítva. Az összehasonlíás alapját a vizsgált fizikai rendszerek egzakt megoldása mellett az egzakt megoldás egy módosítása illetve a vizsgált fizikai rendszer kiterjesztett Lindblad-operátor által vezérelt időfejlődése adja. Az időfejlődést negyedrendű Runge-Kutta módszer segítségével szimulálom. A fejlesztett modell alkalmazásához illetve következményeinek valamint pontosságának vizsgálatához a Wolfram Mathematica szoftvercsomagot használtam.

4.1. Runge-Kutta a közelítés időfejlődésére

Az időfejlődést szimuláló algoritmus megírásának gerincét az időlépés definiálása adta. Ismert, hogy sűrűségmátrix-szal reprezentált kvantummechanikai rendszerek időfejlődését a Neumann-egyenlet kormányozza, ilyen módon az általunk definiált időlépésben is az alábbit vettük alapul, mikor a $d\rho$-t kerestük egy-egy alrendszerre:

$$d\rho = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho]dt \tag{4.1}$$

Értelemszerűen, a közelítés rendjétől függően definiálni kell az adott rendekhez tartozó Hamilton-operátorokat, melyek dimenziója minden rendben különbözni fog. Mivel a közelítés során csak párkölcsönhatásokat veszek figyelembe jelen munkám során, valamint csak a centrál és magspinek között van kölcsönhatás (magspin-magspin kölcsönhatásokkal a dolgozat keretein belül nem foglalkoztam), adott alrendszerekben

definiált párokhoz tartozó Hamilton-operátorokra bevezethetjük a következő jelölést: H_{0,i_n}, $n \in \{1,..,M\}$ ahol M az alrendszer rendjével egyezik meg, i_n-ek pedig az alrendszer elemeit indexelik. Mivel csak párkölcsönhatások vannak, magasabb rendű klaszterekben a párok Hamiltonjait egyszerűen megfelelő számú egységoperátorral való tenzor szorzattal kell bővíteni, hogy a dimenziószáma kompatibilis legyen az alrendszer sűrűségoperátorának dimenziószámával. Tehát például egy 3 magspinből álló rendszer esetén, egy a centrálspin és az i=1,2,3 indexű magspinek között fennálló kölcsönhatást leíró Hamilton-operátor alakja:

$$H = H_0 \otimes H_1 \otimes I \otimes I + H_0 \otimes I \otimes H_2 \otimes I + H_0 \otimes I \otimes I \otimes H_3 \tag{4.2}$$

Az így definiált időfejlődés használatával miután $d\rho_{tot}$-t meghatároztuk, azt tapasztaljuk, hogy a következő időlépésben a különböző alrendszerekben megjelenő, centrális spinre vonatkozó redukált sűrűségmátrixok nem fognak egyezni, mivel:

$$d\rho^N_{(0,i_1,..i_N)} \neq d\rho^N_{(0,j_1,..j_N)} \tag{4.3}$$

azaz különböző alrendszerek járulékai általános esetben különbözőek, és a következő időlépésben ez már azt eredményezné, hogy minden egyes alrendszerben a kiindulási $\rho^N_{(0,i_1,..i_N)}$ különböző, mely eredményeként az időfejlődések eltérők lennének, ezzel szignifikánsan romlana a pontosság és sérülnének a megmaradási tételek. Ezt korrigálva, definiálni kell egy operátort, melyet hattatva a különböző $\rho_{(0,i_1,..i_N)}$-kra azokat összehangolja a többivel, mely operátor megalkotását az alábbiakban véghez is viszem.

4.2. Unitér operátor a korrekcióhoz

A korábban említett probléma feloldásához szükséges korrekciót egy unitér operátorral valósítom meg, mellyel hatva adott alrendszerhez tartozó $\rho_{(0,i_1,..i_N)}$-ra elérthető, hogy minden egyes alrendszerhez tartozó $\rho^N_{(0,i_1,..i_N)}$ a dt időlépés után megegyezzen $\rho_0 + d\rho_{tot}$-al, ahol $d\rho_{tot}$ az összes magspinnek a centrálspin sűrűségoperátorához adott összegzett járulékát jelenti, ρ_0 pedig a centrálspin redukált sűrűségmátrixát, amely itt még minden alrendszerben és rendben egyezik. A kutatás során fejlesztett modell egyik fő ujítása éppen az említett unitér korrekció operátorban rejlik. A korábbi modellekben[14] a korrekciót a csatolt Lindblad-formalizmus keretein belül végeztük el, azonban az így ható operátor nem unitér, ilyen módon az adott alrendszerek $\rho^N_{(0,i_1,..i_N)}$-eihez tartozó Bloch-vektorok hosszát módosítja. A modellel a leírható jelenségek köre emiatt jelentősen szűkült, ezt a problémát a következőkben definiálandó operátor megoldja.

Az említett unitér operátorokat az $n \times n$-es Gell-Mann mátrixok segítségével defi-

niáljuk, mégpedig úgy, hogy bevezetünk olyan speciális forgatásokat, melyek infinitezimális generátor elemei a megfelelő Gell-Mann mátrixok. Erre azért van szükség, mert a korrekciókkal ugyan alapvetően a $\rho^N_{(0,i_1,..i_N)}$ redukált mátrixokat szeretnénk harmonizálni, azonban első rendben az időfejlődést a $\rho_{(0,i_1,..i_N)}$ $4^N \times 4^N$-es sűrűségmátrix és a rá ható megfelelő $H_{(0,i_1,..i_N)}$ segítségével vizsgáljuk. A $\rho_{(0,i_1,..i_N)}$ mátrixokkal jellemzett állapotokban a magspinek különböző spin-állapotaihoz a centrálspin spin-állapotai által generált különböző alterek tartoznak, melyek alterekhez tartozó Bloch vektorok poziciója különbözhet. Ennek folyományaként minden altérben található Bloch vektort korrigálni kell, de olyan módon, hogy a magspinek állapotaira vonatkozó információt ne változtassuk meg. Erre a már említett Gell-Mann mátrixok által generált csoport alkalmas lesz.

A dolgozat eredményeihez használt szimulációk során egy másik módszert használtam az unitér korrekcióra, mely specializált első rendre. Ennek menete abban állt, hogy az **??** összegszabály által megkapott $d\rho_{tot}$ eredő járulékot (4×4-es mátrix) meghatároztam a Neumann-egyenlet általi időfejlődés szerint, illetve meghatároztam minden alrendszerhez tartozó $(d\rho_{tot} - d\rho_i)$ értékeket is. Miután a korrekció fő célja, hogy a különböző alrendszerekből és klaszterekből számolható centrálspin sűrűség operátorokat szinkronizálja, ezért a korrekció során minden alrendszer sűrűségmátrixát úgy módosítom, hogy az a $\rho_0 + d\rho_{tot} := \rho_{tot}$-al egyezzen meg korrekció után. Ennek első lépéseként kiszámoltam $(d\rho_{tot} - d\rho_i)_{1,1} + (d\rho_{tot} - d\rho_i)_{2,2}$ összegét, amely éppen az adott alrendszerben a centrális spin fel állapotához tartozó valószínűség megváltozása. Ezután ezt a különbséget minden alrendszer ρ_i mátrixának első két eleméhez hozzáadtam, olyan módon, hogy a két elem

$$\frac{\rho_{i;1,1}}{\rho_{i;1,1} + \rho_{i;3,3}} \cdot [(d\rho_{tot} - d\rho_i)_{1,1} + (d\rho_{tot} - d\rho_i)_{2,2}] \tag{4.4}$$

$$\frac{\rho_{i;2,2}}{\rho_{i;2,2} + \rho_{i;4,4}} \cdot [(d\rho_{tot} - d\rho_i)_{1,1} + (d\rho_{tot} - d\rho_i)_{2,2}] \tag{4.5}$$

járulékot kapott, így megtartva az adott magspin alterekhez tartozó valószínűségeket ($\rho_{i,11}$ és $\rho_{i,22}$ egymáshoz viszonyított arányát). Ez szemléletesen azt eredményezte, hogy mindkét magspin altérben a Bloch-vektort elforgattam x-y síkbeli tengelye körül. Hogy a transzformáció unitér legyen, a Bloch-vektor x-y vetületének nagyságát is korrigálni kell mindkét altérben. Ehhez kihasználtam, hogy

$$(v_z + dv_z)^2 + (v_x + dv_x)^2 + (v_y + dv_y)^2 = v_z^2 + v_x^2 + v_y^2 = |v|^2 \tag{4.6}$$

(hiszen unitér transzformációt szeretnék), ahol a dv_i-k már nem a dt időlépés alatti változást, hanem a korrekció miatti változást jelölik. Ebből pedig

$$\frac{(v_x + dv_x)^2 + (v_y + dv_y)^2}{v_x^2 + v_y^2} = \frac{|v|^2 - (v_z + dv_z)^2}{v_x^2 + v_y^2} := \alpha, \tag{4.7}$$

$$(v_x + dv_x)^2 + (v_y + dv_y)^2 = \alpha(v_x^2 + v_y^2) \tag{4.8}$$

és mivel adott magspin altérhez tartozó sűrűségoperátor off-diagonális elemei a megfelelő Bloch-vektor $v_x \pm i \cdot v_y$ elemei, így

$$(v_x + dv_x)^2 + (v_y + dv_y)^2 - (v_x)^2 - (v_y)^2 = |d\rho_{i,off}|^2 \tag{4.9}$$

ahol $d\rho_{i,off}$ megfelelő alterekhez tartozó offdiagonális elemeket jelöli (d itt szintén a korrekció miatti változásra utal) . Ilyen módon a két magspin altér Bloch-vektorának z komponensének korrekciói:

$$dv_{z,1} = \left(2\frac{\rho_{i;1,1}}{\rho_{i;1,1} + \rho_{i;3,3}} \cdot [(d\rho_{tot} - d\rho_i)_{1,1} + (d\rho_{tot} - d\rho_i)_{2,2}]\right) - 1 \tag{4.10}$$

$$dv_{z,2} = 2\left(\frac{\rho_{i;2,2}}{\rho_{i;2,2} + \rho_{i;4,4}} \cdot [(d\rho_{tot} - d\rho_i)_{1,1} + (d\rho_{tot} - d\rho_i)_{2,2}]\right) - 1 \tag{4.11}$$

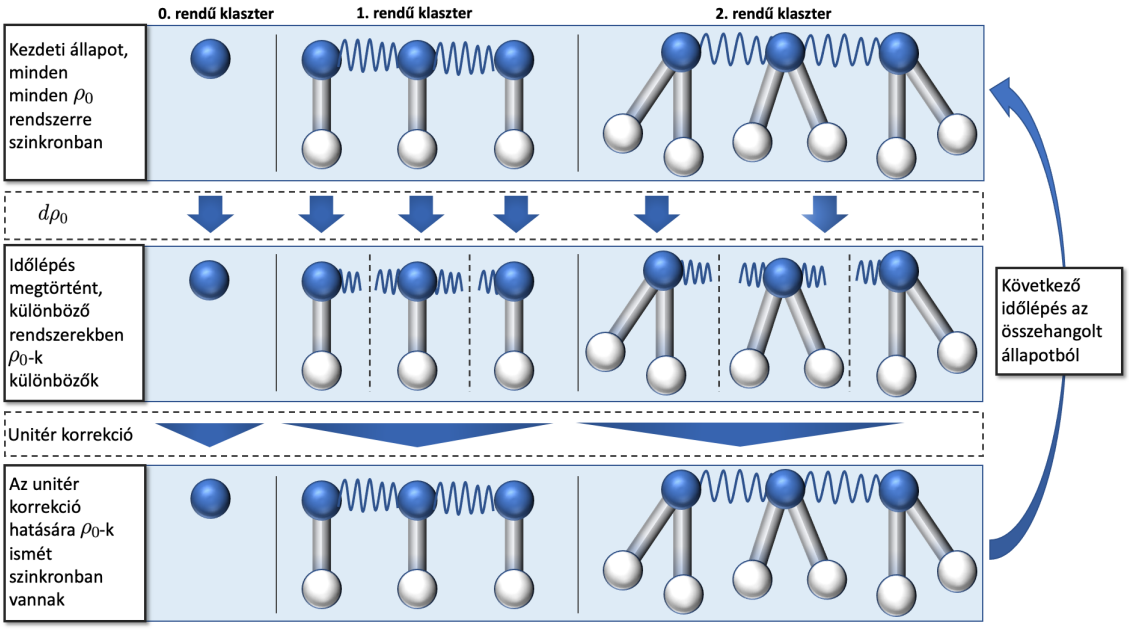
x,y komponensek korrekciói pedig:

$$dv_{x^2+y^2,1} = (v_{x,1}^2 + v_{y,1}^2)(\alpha_1 - 1) \tag{4.12}$$

$$dv_{x^2+y^2,2} = (v_{x,2}^2 + v_{y,2}^2)(\alpha_2 - 1) \tag{4.13}$$

A bemutatott szimulációkban ezzel a korrekcióval a dolgoztam.

Összefoglalva tehát a 4.1 ábra szemlélteti, hogy mi történik egy-egy időlépésben.



4.1. ábra. Egy időlépés folyamata, ahogy látható, adott kezdeti állapotban minden alrendszerből kiredukálva a centrálspin sűrűségmátrixát ezek megegyeznek, az alrendszerenkénti külön időfejlődés azonban ezt elrontja, melyet egy köztes lépéssel korrigálunk, majd az időlépés ismét egy szinkronban levő állapotból indul.

4.3. Nitrogén-vakancia centrum, mint releváns fizikai rendszer

Ebben a pontban az NV centrum Hamilton-operátorát ismertetem részletesen, az itt megadott információkra később támaszkodni fogok, ugyanis a dolgozatom végén bemutatok egy az NV center Hamilton-operátorait használó szimulációt és eredményeit.

Nitrogén-Vakancia centrumnak a gyémánt egy jellegzetes kristályhibáját nevezzük, mely úgy áll elő, hogy egy szénatom helyére Nitrogén atom kerül, a szubsztitúciós Nitrogénatom melletti egy rácspontban pedig a szomszédos szénatom helyett egy vakancia van jelen. Ennek egy jellegzetessége, mely modern kvantuminformatikai szempontból és az általunk vizsgált témakör szempontjából is kifejezetten relevánsá teszi, hogy elektronspinje szobahőmérsékleten manipulálható. A Hamilton operátor a centrális spin esetére ebben a rendszerben a következő tagokból áll össze:

$$H_{NV} = H_{zfs} + H_{Zee} + H_{nuczee} + H_{quad} + H_{hyp}. \tag{4.14}$$

H_{NV} tagjait az alábbiak részletezem, ahol a dolgozat során eddig használt jelölésektől annyiban eltérek, hogy az egyértelműség kedvéért az operátorokat ebben a szekcióban kalappal jelölöm.

- H_{zfs}: zero-field splitting kölcsönhatási Hamilton, alakja az alábbi:

$$\frac{H_{zsf}}{h} = D\left(\hat{S_z}^2 - \frac{S(S+1)}{3}\hat{\mathcal{I}}\right) + \frac{E}{2}\left(\hat{S_+}^2 + \hat{S_-}^2\right), \tag{4.15}$$

ahol S=1, $\hat{\mathcal{I}}$ a 3x3 identikus mátrix, $\hat{S_z}, \hat{S_+}, \hat{S_-}$ a triplet spin operátorok, D és E pedig a párhuzamos és merőleges zero-field splitting paraméterek.

- H_{Zee}: Zeeman-kölcsönhatásért felelős tag, alakja a következő:

$$\frac{H_{Zee}}{h} = g_e \mu_B \mathbf{B}\hat{\mathbf{S}}, \tag{4.16}$$

ahol g az elektron Landé-faktora, μ_B a Bohr-magneton, $\mathbf{B}$ a mágneses indukció vektor (z a kvantálási tengely, ezzel párhuzamos $\mathbf{B}$), $\hat{\mathbf{S}}$ pedig a spin operátorokból képzett vektor.

- H_{nuczee}: nukleáris Zeeman-kölcsönhatás tagja, alakja:

$$\frac{H_{Zee}}{h} = g_{N,i}\mu_N \mu_B \mathbf{I}_i \hat{\mathbf{S}}. \tag{4.17}$$

Itt $g_{N,i}$ az i indexű nukleáris spin g faktora, μ_N a nukleáris magneton, $\hat{\mathbf{I}}_i$ pedig az i indexű nukleáris spin operátor vektora.

- H_{quad}: nukleáris kvadrupól splitting tag ^{14}N-re vonatkozóan, mely a következő alakban áll elő:

$$\frac{H_{quad}}{h} = Q_{^{14}N}\left(\hat{I}_z^2 + \frac{I(I+1)}{3}\hat{\mathcal{I}}\right), \tag{4.18}$$

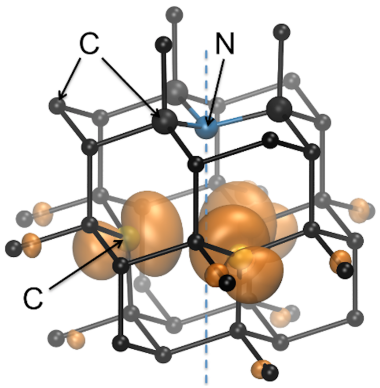
ahol I=1 a ^{14}N spin tripletre.

- H_{hyp}: hiperfinom felhasadás tagja, alakja:

$$\frac{H_{hyp}}{h} = \sum_i \hat{\mathbf{S}}\hat{A}\hat{\mathbf{I}}_i \approx \sum_i \hat{A}_{\parallel,i}\hat{S}_z\hat{I}_{z,i} + \sum_i \hat{A}_{\perp,i}\left(\hat{S}_x\hat{I}_{x,i} + \hat{S}_y\hat{I}_{y,i}\right), \tag{4.19}$$

ahol $\hat{A}$ 3x3-as szimmetrikus tenzor $\hat{A}_\parallel$, $\hat{A}_\perp$ pedig a merőleges és párhuzamos hiperfinom paraméterek.

4.2 ábra az említett kristályszerkezetet hivatott bemutatni.



4.2. ábra. Gyémánt NV center szerkezete és spin sűrűsége.

4.4. Szimulációk és eredményeik

4.4.1. Egzakt és közelítő módszerek összehasonlítása

Az alábbiakban a fentebb ismertetett algoritmus használatával lefuttatott szimulációk eredményeit ismertetem és hasonlítom össze több, már ismert módszerrel végzett szimuláció eredményével. Az összehasonlítás során három különböző "eljárás" eredményeit vizsgálom és hasonlítom össze, ezek a következőek:

- Egzakt időfejlődés azzal a megkötéssel hogy a sűrűségmátrix magspin-magspin korrelációkért felelős elemeit minden időlépésben nullává teszem.
- Csatolt Lindblad-egyenlet által vezérelt időfejlődés.[14]
- A kidolgozott sorfejtés és unitér korrekció által vezérelt időfejlődés.

A szimulációkhoz kapcsolodó fő adatok, eredmények és értékelések az alábbiakban kerülnek taglalásra. Fontos megjegyezni, hogy a kvantumbitek között n-edrendű sor esetén mindig csak párkölcsönhatásokkal dolgozunk, mely kölcsönhatások a centrálspin és adott magspin között hatnak, valamint az általunk vizsgált esetekben nincsenek kölcsönhatások a magspinek között. Ebből kifolyólag, amikor a Hamilton-operátorokat megadom, akkor adott párra vonatkozó operátort adok meg és az ismertetett kezdőállapotok is kettő-spin rendszerekre vonatkoznak, ezek azonban triviálisan extrapolálhatók több-test rendszerekre, ha azok állapotait bele akarjuk foglalni a Hilbert-térbe de nem hatnak kölcsön az említett párral. A szimulációk vizsgálata során elsőként elsőrendben hasonlítom össze a már említett kettő közelítési módszert az egzakt illetve a korreláció-mentes egzakt időfejlődéssel, három különböző Hamilton-operátort használva N=2 mellett.

1. Elsőként az alábbi Hamilton operátorral és kezdeti sűrűségmátrix-szal megadható rendszert vizsgálom:

$$H_1 = S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+ \tag{4.20}$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{4.21}$$

melynek eredményeit az 4.3 grafikon tartalmazza.

2. Következő vizsgált rendszer ennek egy kissé módosított verziója, ahol a Hamilton operátor a következő:

$$H_2 = AS_z \otimes I + S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+. \tag{4.22}$$

A kezdeti állapot szintén a fentebb definiált ρ_1, a kapott eredmények pedig az 4.4 ábrán láthatók.

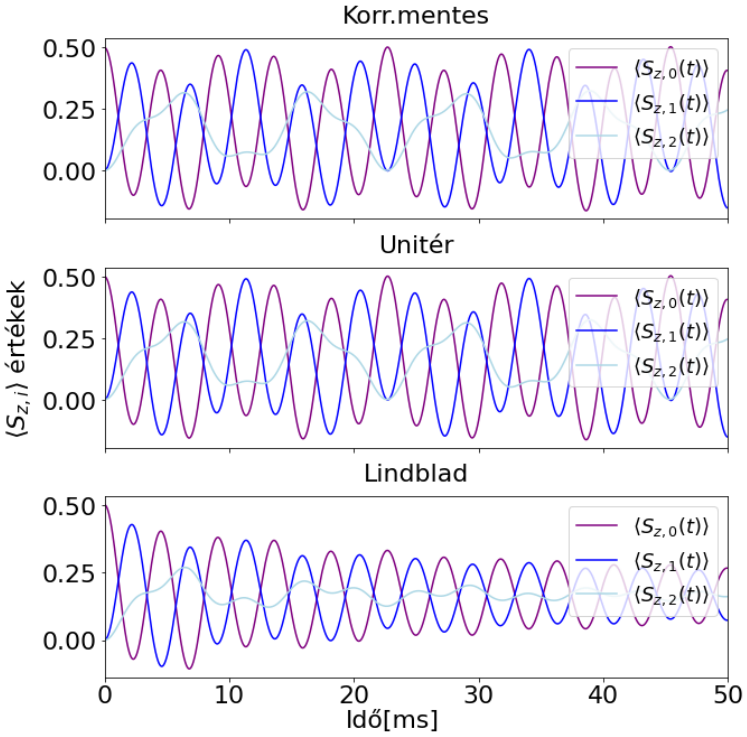
3. Harmadik konstrukció egy integrálható rendszer melyhez tartozó Hamilton-operátor:

$$H_3 = AS_z \otimes I + S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+ + BS_z \otimes S_z. \tag{4.23}$$

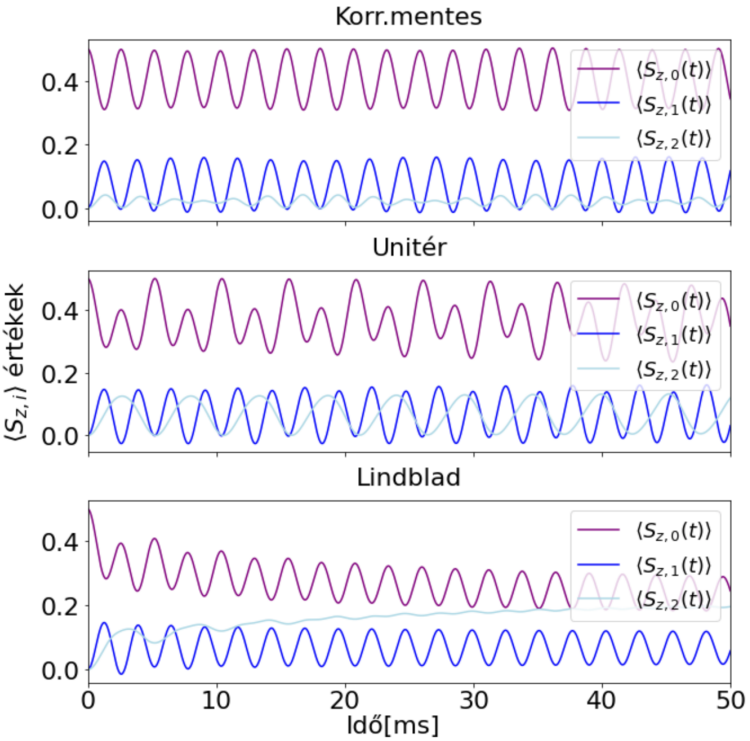
A kezdeti sűrűségmátrix ismét ρ_1, a szimulációból kapott eredményeket pedig 4.5 szemlélteti.

4. Minden egyes Hamilton-operátor és számítási eljárás mellett kiszámoltam az S_z várható értékek összegének időfüggését is az egész rendszerre vonatkozóan, ennek vizualizációja a 4.6 ábrán látható. Leolvasható, hogy ahogy egzakt esetben, úgy a közelítés használatával is megmarad ez a mennyiség, amelyet korábban elméleti megfontolások alapján is beláttam. Ez a megmaradás a fejlesztett közelítés egy kiemelten fontos tulajdonsága.

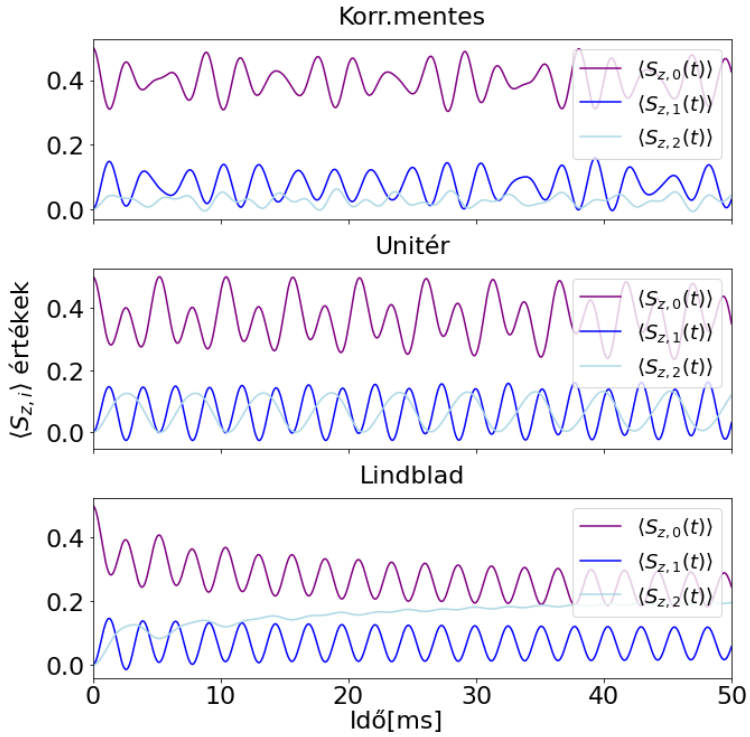
Az ábrák tehát azt mutatják, hogy amennyiben egy sok spin rendszer időfejlődését vizsgálom olyan módon, hogy az egzakt időfejlődésben a magspinek közötti korrelációkat megszüntetem, akkor az általam bevezetett összegszabállyal és unitér korrekcióval megvalósított közelítési eljárás az ilyen módon módosított egzakt időfejlődést szinte tökéletesen lekövető időfejlődést ad a vizsgált esetekben. Természetesen az ebből levonható tanulságok köre korlátozott, hiszen csak 2 magspinnel rendelkező rendszereket vizsgáltam elsőrendű közelítésben.



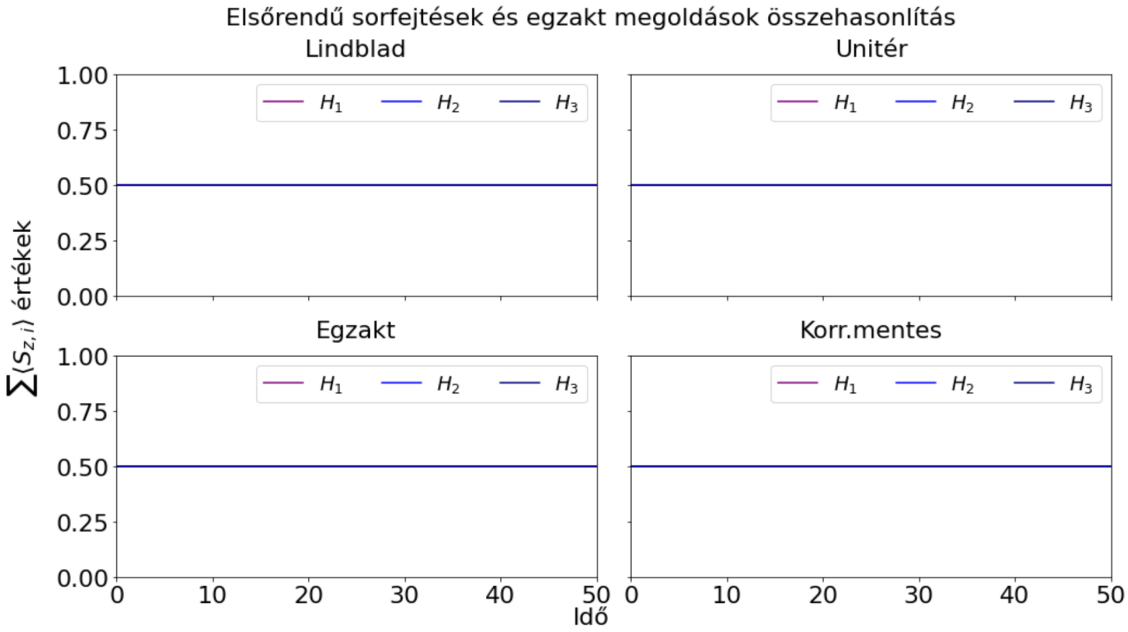
4.3. ábra. 3 különböző módszerrel számolt időfejlődés a H_1 Hamilton operátor és ρ_1 kezdőállapot mellett, tsim=50, dt=0.005.



4.4. ábra. 3 különböző módszerrel számolt időfejlődés a H_2 Hamilton operátor és ρ_1 kezdőállapot mellett, t=50, dt=0.005, A=3.



4.5. ábra. 3 különböző módszerrel számolt időfejlődés a H_3 Hamilton operátor és ρ_1 kezdőállapot mellett, t=50, dt=0.005, A=3, B=2.



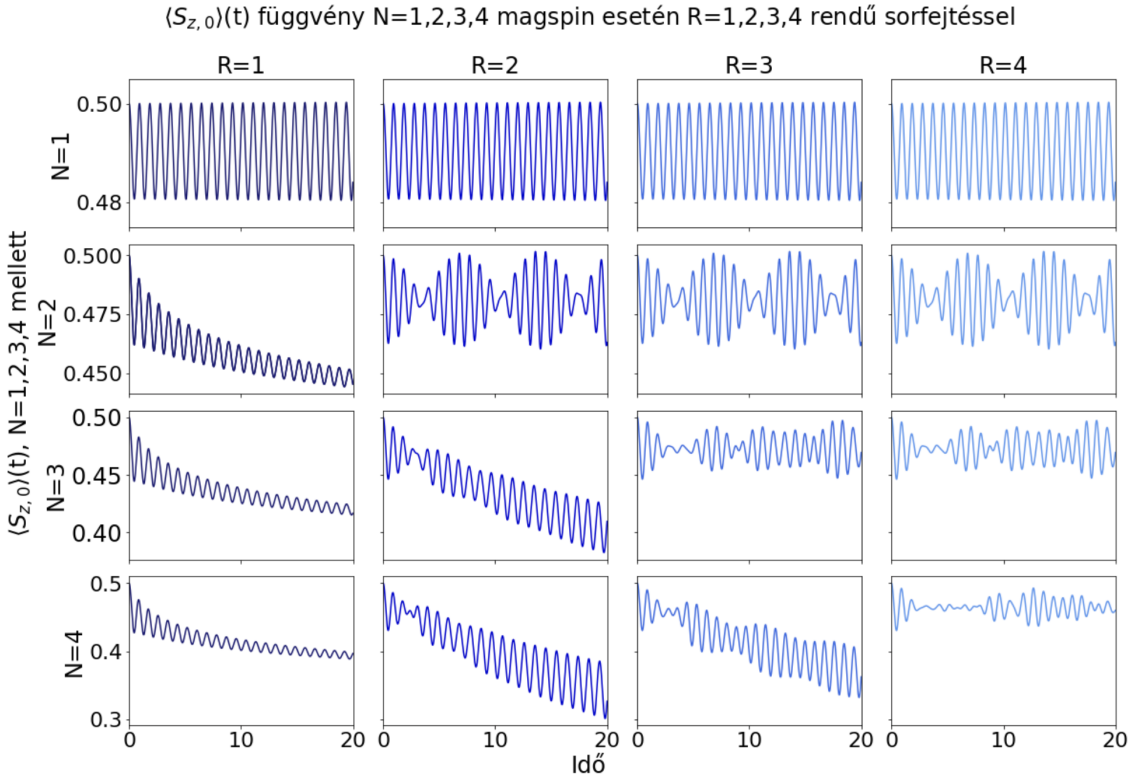
4.6. ábra. 4 különböző módszerrel számolt időfejlődés a H_1, H_2, H_3 Hamilton operátor és ρ_1 kezdőállapot mellett, t=50, dt=0.005, A=3, B=2.

4.4.2. Magasabbrendű közelítések

Következőkben különböző számú magspinek esetére különböző rendű sorfejtések által meghatározott időfejlődéseket fogok vizsgálni, a rendszerbeli centrálspin S_z várható értékének időfüggésén keresztül, ezáltal jól összehasonlíthatóvá válik a különböző rendek egymáshoz való viszonya és a pontosság alakulása a sorfejtés rendjének függvényében. Az ilyen módon történő összehasonlításhoz használt Hamilton operátor az alábbi:

$$H = 10 \cdot S_z \otimes I + S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+ + 3 \cdot S_z \otimes S_z, \tag{4.24}$$

mely tetszőleges rendre könnyedén általánosítható a megfelelő egységoperátorrokkal való tenzorszorzatok elvégzésével. Ezen szimulációk elvégzéséhez a témavezetőm által [14] cikkben ismertetett módosított Lindblad-egyenleten alapuló korrekciós eljárását használom, mert az általam fejlesztett unitér korrekciós eljárás még nincs implementálva magasabb rendekre, azonban a sor együtthatóit itt is az általam levezetett képlet alapján határozom meg. A kapott eredményeket a 4.7 ábra mutatja.



4.7. ábra. N=1,2,3,4 és R=1,2,3,4 esetén vizsgált időfejlődések t=20 mellett

Az ábrán jól látható, hogy ahogy a sorfejtés rendjét növelem, a közelítéssel kapott időfejlődés konvergál egy meghatározott időfejlődéshez, és miután a sorfejtés rendje elérte a magspinek számát, a rend további növelésének nincsen értelme, hiszen a magasabb rendű tagoknak már nincsen addicionális járuléka. Elméleti számításokkal és numerikusan is megmutatható, hogy amennyiben a sorfejtés rendje megegyezik

a magspinek számával, a közelítéssel kapott időfejlődés megegyezik az egzakt időfejlődéssel. Éppen ezt szerettem volna elérni a módszer megalkotása során. Az is megfigyelhető, hogy a módósított Lindblad-egyenlet használata miatt a közelített megoldásokban fellép egy nem kívánt lecsengés, az unitér korrekció magasabb rendekre való implementálásával ez a későbbiekben kiküszöbölhető lesz.

4.4.3. Konvergencia vizsgálata

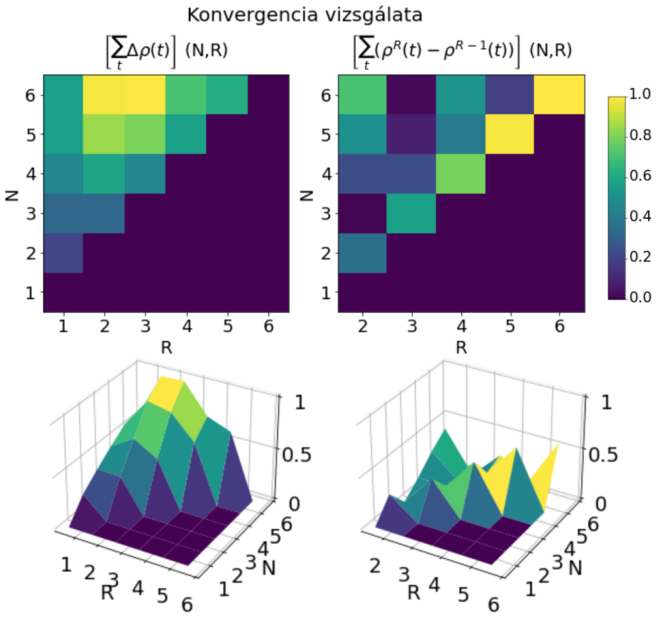
Sok szó esett már róla a dolgozat során, hogy szeretnénk, ha az általunk bevezetett sorfejtés konvergens lenne és megfelelő rendben az egzakt megoldást adná vissza. A következőkben a fentebb bemutatott szimuláció eredményeit használva azt vizsgálom meg, hogy ez milyen mértékben teljesül. A vizsgálódást olyan módon végeztem, hogy N=1,2,3,4,5,6 magspinből álló rendszereket sorba fejtettem R=1,2,3,4,5,6 rendben, majd vizsgáltam az időfejlődésük pontosságát úgy, hogy minden N és R esetére kiszámoltam az egzakt megoldástól való eltérésüket illetve az adott N-hez tartozó sorban minden R-esetén kiszámoltam az R-1 rendhez adott addicionális járulékát. Az egzakt időfejlődéstől való eltérést az alábbi formula alapján számoltam

$$\sum_{0}^{tsim} dt|\langle S_z\rangle^n(t) - \langle S_z\rangle_{egz}(t)| = \Delta S_z, \tag{4.25}$$

az addicionális járulékokat pedig a következővel:

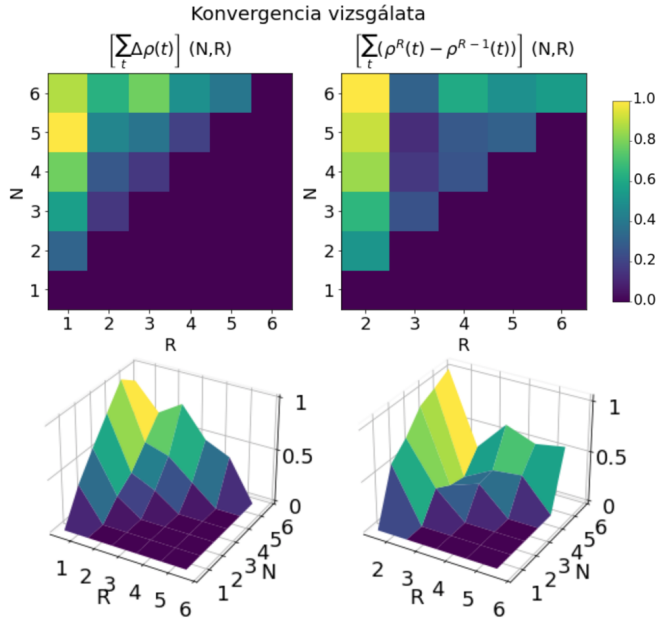
$$\sum_{0}^{tsim} dt|\langle S_z\rangle^n(t) - \langle S_z\rangle^{n-1}(t)| = \Delta S_z^n. \tag{4.26}$$

Itt $\langle S_z\rangle^n(t)$ az n-edrendű tag időfüggése, $\langle S_z\rangle^{n-1}(t)$ az $n-1$ rendé , $\langle S_z\rangle_{egz}(t)$ az egzakt időfüggés, $tsim$ pedig azt az időpillanatot jelöli ameddig a rendszer időfejlődését vizsgálom. A szimuláció miatt integrál helyett itt elég volt szummát használni, hiszen diszkrét időlépésekkel dolgoztunk. Az ilyen módon elvégzett számítások eredményeit az alábbi ábrák és magyarázatok foglalják össze, ahol a fentebb már említett, egzakttól való eltérést és addicionális járulékokat ábrázolom N,R függvényében.



4.8. ábra. Az egzakt időfejlődéstől való eltérés (bal oldal) és a sor R rendű tagjának addicionális járuléka (jobb oldal),N=1-6 magspinből álló rendszerekben, R=1-6 rendű sorfejtés esetén 2 és 3 dimenzióban ábrázolva. (tsim=20, dt=0.005)

Látható, hogy a konvergencia tekintetében nem várt mintázatot kapunk, egészen pontosan azt, hogy az egzakt időfejlődéstől való eltérés több helyen kisebb alacsonyabb rendben mint magasabb rendekben, illetve hogy az addicionális járulékok értékének lecsengése inkonzisztens a sor rendjének növelésével. Ezek betudhatók annak, hogy a csatolt Lindblad-egyenlet által vezérelt korrekció okoz egy nem kívánt lecsengést. Hogy leellenőrizzük a sor konvergenciáját a lecsengés hatásának minimalizálása mellett, ugyanezeket a számolásokat elvégeztem egy rövidebb időintervallumra, így a lecsengés sokkal kevésbé jelentős. Ez alább látható:



4.9. ábra. Az egzakt időfejlődéstől való eltérés (bal oldal) és a sor R rendű tagjának addicionális járuléka (jobb oldal),N=1-6 magspinből álló rendszerekben, R=1-6 rendű sorfejtés esetén 2 és 3 dimenzióban ábrázolva.(tsim=4, dt=0.005)

Kisebb időintervallumra a konvergencia és az addicionális járulékok alakulása sokkal jobban közelíti az elvárt viselkedést, ez szintén motiválja a törekvésünket, hogy egy teszőleges rendben használható, unitér korrigáló transzormációt használó sor-

fejtést kreáljunk, hiszen ilyen módon a konvergencia konzisztensebb és a közelítés pontosabb.

4.4.4. Nitrogén-Vakancia centrum időfejlődése

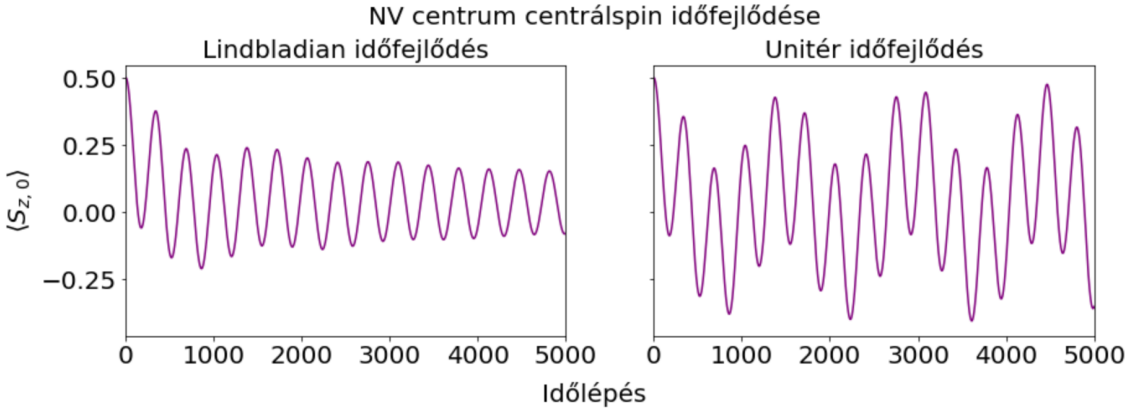
Végül pedig, az egész dolgozat fő motivációjául szolgáló NV-centrumot modellező rendszer időfejlődését vizsgálom 27 magspin esetére, ahol a Hamilton-operátorok meghatározásához a [8] cikk adatait használtam, ahol az elsőrendű, tehát a centrálspint és egy magspint tartalmazó alrendszerek általános alakban megadható Hamilton-operátora

$$H = B(S_z \otimes I) + A_{\parallel}(S_+ \otimes S_- + S_- \otimes S_+) + A_{\perp}(S_z \otimes S_z). \tag{4.27}$$

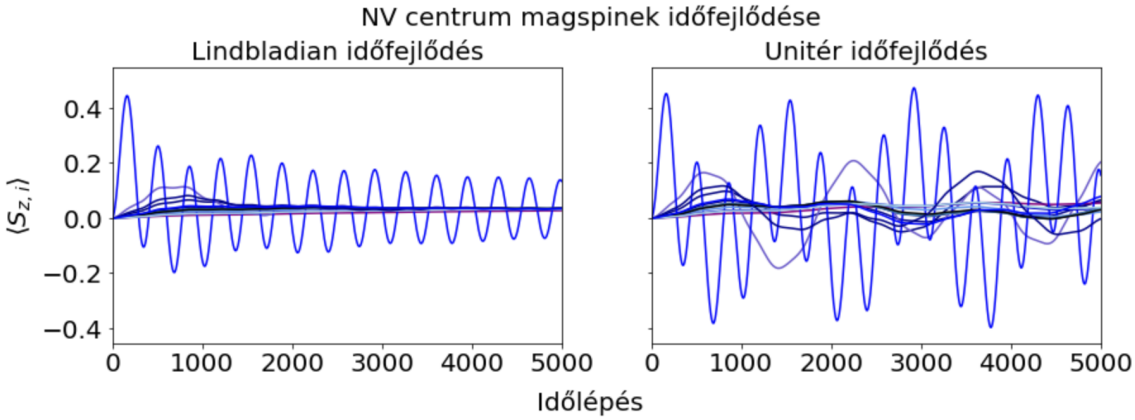
A cikk supplementary anyagában az $A_{\parallel}$ és $A_{\perp}$ értékei minden egyes alrendszerre megtalálhatók. Ezeket felhasználva a 14 legerősebben kölcsönható magspin által generált időfejlődést szimulálom, a B értékét minden alrendszerben 1-nek tekintve. A kezdeti állapot a következő operátorral adott:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4.28}$$

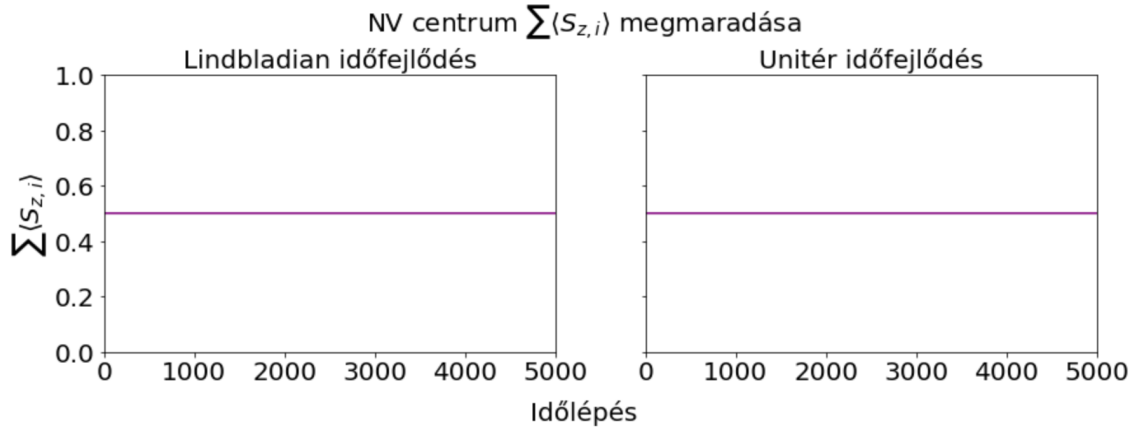
A kapott eredmények pedig 4.10, 4.11, 4.12 grafikonon láthatók.



4.10. ábra. NV centrum centrálspinjének időfejlődése a két különböző korrekció használatával első rendben.

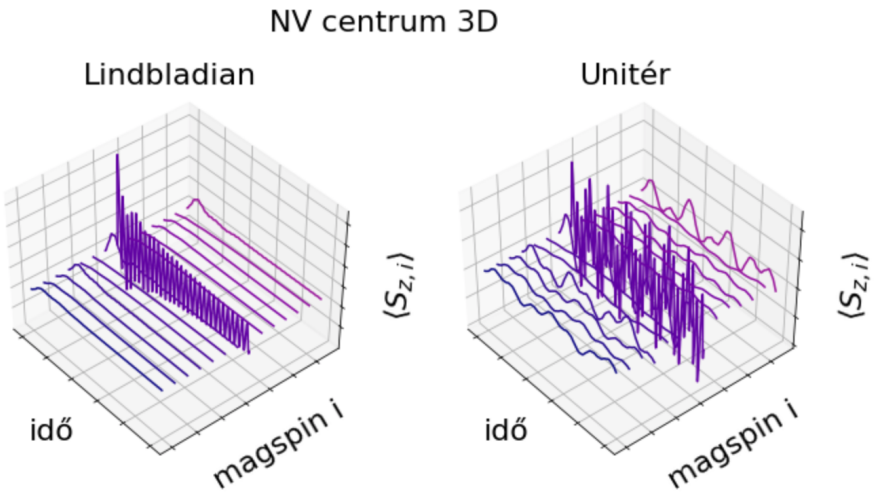


4.11. ábra. NV centrum magspinjeinek időfejlődése a két különböző korrekció használatával első rendben.



4.12. ábra. NV centrum esetén az egész vizsgált rendszer Spin z várható értékének időfejlődése a két különböző korrekció használatával első rendben.

A 4.11 plotot az áttekinthetőség és szemléletesség kedvéért három dimenzióban is mellékelem, így jobban elkülöníthetőek az egyes magspinekhez tartozó görbék, ezeket tartalmazza a 4.13 ábra. Látható itt is, hogy a [8]-ban C9-el jelölt spinhez tartozó görbe amplitúdója kiemelkedően nagy,melynek oka, hogy $A_{\|}$ együtthatója jóval nagyobb a többinél.



4.13. ábra. NV centrum magspinjeinek időfejlődése 3 dimenzióban ábrázolva, a tengelyeken az átláthatóság kedvéért a skálát nem tüntettem fel, az könnyedén leolvasható 4.11 ábráról, ez az ábra csak szemléltetés.

4.5. Numerikus számítások eredményeinek összegzése és értékelése

A numerikus számítások során szimuláltam a csatolt Lindblad, illetve az általam bevezetett unitér korrekcióval léptetett időfejlődést első rendben és összehasonlítottam az egzakt időfejlődéssel, illetve ennek egy módosításával. Ennek eredményeként azt találtam, hogy a sorfejtés már első rendben is jól követi az egzakt megoldást, azonban ez a rend még nem képes követni az időfejlődés során megjelenő lebegési jelenségeket, ami természetesen nem meglepő, annak tudatában, hogy ezt a korrelációk okozzák melyek legkorábban másodrendben jelennek meg.

Vizsgáltam magasabb rendű sorok segítségével is az időfejlődést, illetve a konvergenciát ezen magasabb rendű sorok esetén, és azt találtam, hogy amennyiben a csatolt Lindblad-egyenlet által létrehozott exponenciális lecsengés hatását kellően csökkentem, a sor a várakozásoknak megfelelően konvergál.

Végül megvizsgáltam egy valódi NV center Hamilton-operátorai által vezérelt időfejlődést is, és ebben a rendszerben is látható volt, hogy az általam bevezetett unitér korrekció nagyon jól követi a témavezetőm által korábban fejlesztett csatolt Lindblad-egyenletre támaszkodó korrekciót, azonban a nem kívánt lecsengést megszünteti.

A kutatás kezdetekor kitűzött és a bevezetés során ismertetett célkitűzések közül, a számítások eredményeinek figyelembevételével az alábbi pontokat tekintem teljesítettnek:

- A központi rendszer Hamilton-operátorának a közelítésére nincsen szükség, a vizsgált rendszerekben egzakt Hamilton-operátorokkal lehet dolgozni.

- A központi rendszer és a környezet kölcsönhatásának Hamilton-operátorának a közelítésére nincsen szükség, egzakt Hamilton-operátor használható.
- A közelítések pontossága szisztematikusan javítható.
- A közelítés a vizsgált rendekben konvergens.
- A közelítés teljesíti S_z oprátor várható értékére kiróható megmaradási tételt.
- Az unitér korrekciót használó közelítés nem eredményez nem kívánt dekoherenciát.

5. fejezet

Összefoglalás, kitekintés és jövőbeli tervek

A jelen dolgozatban részletezett tudományos diákköri kutatásom eredményeként az alábbiakat valósítottam meg:

- Előállítottam egy képletet mely tetszőleges rendben megadja a fentebbi kritériumnak megfelelő sor együtthatóit.
- A levezetett sorfejtéssel kapcsolatosan beláttam bizonyos megmaradási tételeket és szimmetriákat.
- A sorfejtés során a centrális spinek időfejlődésében korrekciót kell végezni, erre egy új módszert fejlesztettem ki.
- Az általam definiált összegképlet és korrekció használatával szimulációkat végeztem, mellyel ezek viselkedését vizsgáltam.
- A témavezetőm által egy korábban fejlesztett másik korrekciós eljárás tulajdonságait és konvergenciáját vizsgáltam.
- A két különböző korrekciós eljárás eredményeit összehasonlítottam egymással és egzakt időfejlődésekkel.

A kifejlesztett közelítő eljárás használatával rengeteg fontos rendszer, köztük a gyémánt NV-centrum viselkedése is korábban elérhetetlen pontossággal szimulálható.

A kutatás továbbfejlesztése jelenleg is folyamatban van, melynek keretében mind az elméleti alapokat, mind pedig az elvégzett szimulációk körét jelentősen bővítem. Fő céljaim a kutatás folytatása során az alábbiak:

- Az unitér korrekciót használó sorfejtés elméletének kidolgozása általános rendű esetre, olyan minőségben, hogy ezzel egy hatékony, konvergens és jól implementálható algoritmus szülessen, így tetszőleges méretű rendszerek időfejlődése közelíthetővé válik nem kívánt dekoherencia nélkül.

- A módszer általánosítása olyan esetekre, ahol a központi spin helyett központi spin-rendszereket (kvantum nodeokat) vizsgálok
- További általánosítások olyan rendszerekre, melyekben nincsenek kitüntetett objektumok, minden spin közötti kölcsönhatást figyelembe veszek és közelítek, például: spin láncok, spin üvegek, spin rácsok.

Hivatkozások

[1] Marcus Doherty. „Quantum accelerators: a new trajectory of quantum computers”. *Digitale Welt* 5.2 (2021. ápr.), 74–79. old. ISSN: 2569-1996. (Elérés dátuma 2021. 11. 22.).

[2] J. R. Weber és tsai. „Quantum computing with defects”. *PNAS* 107.19 (2010), 8513–8518. old.

[3] Gary Wolfowicz és tsai. „Quantum guidelines for solid-state spin defects”. *Nature Reviews Materials* (2021. ápr. 26.). Publisher: Nature Publishing Group, 1–20. old. ISSN: 2058-8437. (Elérés dátuma 2021. 05. 07.).

[4] Stephanie Wehner, David Elkouss és Ronald Hanson. „Quantum internet: A vision for the road ahead”. *Science* 362.6412 (2018. okt. 19.). Publisher: American Association for the Advancement of Science, eaam9288. (Elérés dátuma 2021. 12. 14.).

[5] Marcus W. Doherty és tsai. „The nitrogen-vacancy colour centre in diamond”. *Physics Reports*. The nitrogen-vacancy colour centre in diamond 528.1 (2013. júl. 1.), 1–45. old. ISSN: 0370-1573. (Elérés dátuma 2020. 03. 25.).

[6] M. H. Abobeih és tsai. „Fault-tolerant operation of a logical qubit in a diamond quantum processor”. *Nature* 606.7916 (2022. jún.). Number: 7916 Publisher: Nature Publishing Group, 884–889. old. ISSN: 1476-4687. (Elérés dátuma 2022. 11. 17.).

[7] C.E. Bradley és tsai. „A Ten-Qubit Solid-State Spin Register with Quantum Memory up to One Minute”. *Physical Review X* 9.3 (2019. szept. 11.). Publisher: American Physical Society, 31045. old. (Elérés dátuma 2020. 03. 24.).

[8] M. H. Abobeih és tsai. „Atomic-scale imaging of a 27-nuclear-spin cluster using a quantum sensor”. *Nature* 576.7787 (2019. dec.), 411–415. old. ISSN: 1476-4687. (Elérés dátuma 2021. 01. 21.).

[9] G. Balasubramanian és tsai. „Ultralong spin coherence time in isotopically engineered diamond”. *Nature Mater.* 8 (2009), 383. old.

[10] Hosung Seo és tsai. „Quantum decoherence dynamics of divacancy spins in silicon carbide”. *Nature Communications* 7.1 (2016. szept. 29.), 12935. old. ISSN: 2041-1723. (Elérés dátuma 2020. 11. 03.).

[11] Mykyta Onizhuk és tsai. „Probing the Coherence of Solid-State Qubits at Avoided Crossings”. *PRX Quantum* 2 (1 2021), 10311. old.

[12] Daniel A. Lidar. *Lecture Notes on the Theory of Open Quantum Systems*. 2020. febr. 20. arXiv: `1902.00967[quant-ph]`. (Elérés dátuma 2022. 11. 17.).

[13] Carlos Alexandre Brasil, Felipe Fernandes Fanchini és Reginaldo de Jesus Napolitano. „A simple derivation of the Lindblad equation”. *Revista Brasileira de Ensino de Física* 35.1 (2013. márc.), 1–09. old. ISSN: 1806-9126, 1806-1117. arXiv: `1110.2122[quant-ph]`. (Elérés dátuma 2022. 11. 17.).

[14] Viktor Ivády. „Longitudinal spin relaxation model applied to point-defect qubit systems”. *Phys. Rev. B* 101 (15 2020), 155203. old.