

الله
صَلَّى
وَسَلَّمَ



دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده فیزیک

گزارش پژوهش

کارشناسی

عنوان

**بررسی اثرات و اهمدوسی در یک
سیستم اسپین-مرکزی**

نگارنده

محمدحسین سلیمانی

استاد راهنما

دکتر مهدی عبدی

شهریور ۱۴۰۰

سپاس‌گزاری

در آغاز وظیفه خود می‌دانم از زحمات بی‌دریغ استاد راهنمای خود، آقای دکتر مهدی عبدی،
صمیمانه تشکر و قدردانی نمایم که قطعاً بدون راهنمایی‌های ارزنده ایشان، این مجموعه به انجام
نمی‌رسید.

همچنین لازم می‌دانم از خانم دکتر فاطمه طریقی تابش که در انجام این پروژه بسیار به بندۀ
کمک کردند، تشکر نمایم.

در آخر از آقایان آیدین ممتاز، احسان قریشی، سروش عطایی و محمدعلی طبائیان که هر
کدام به نحوی در انجام این گزارش با اینجانب همکاری داشته‌اند، تشکر می‌نمایم.

محمدحسین سلیمی

شهریور ۱۴۰۰

فهرست مطالب

سه

سپاسگزاری

شش

چکیده

۱

مقدّمه

۲

فصل ۱ چندجمله‌ای‌های چبیشف

۳

۱.۱ تعاریف اولیه

۳

۲.۱ چندجمله‌ای‌های چبیشف نوع اول

۶

۳.۱ بسط چبیشف

۷

فصل ۲ مدل‌سازی سامانه اسپین مرکزی

۷

۱.۲ واهمدوسی

۹

۲.۲ مدل‌سازی انباره اسپین

۱۱

۳.۲ بررسی واهمدوسی انباره اسپین با استفاده از بسط چبیشف

۱۴

فصل ۳ نتایج شبیه‌سازی

۱۴

۱.۳ میرایی نوسانات واهمدوسی اسپین

۱۶

۲.۳ Qutip

۱۷

۳.۳ میزان خطأ

۱۸

۴.۳ نتیجه‌گیری

۲۰

پیوست الف کد پایتون

مراجع

۲۴

چکیده

در این گزارش یک سامانه اسپین-مرکزی، متشکل از تعدادی اسپین جفت شده مرکزی و تعدادی اسپین محیطی که در اندرکنش با یک دیگر هستند را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. با استفاده از این سامانه می‌توان واهمدوسی به وجود آمده در اسپین‌های مرکزی به علت برهمنکنش آنها با اسپین‌های محیطی را مدل سازی نمود. برای بررسی عددی این پدیده از روش بسط چبیشف استفاده می‌کنیم. در نهایت مدل به دست آمده را برای یک سامانه با دو اسپین مرکزی و شش اسپین محیطی شبیه‌سازی کرده و نتایج حاصل را با نتایجی که از بسته کیوتیپ (جعبه ابزار کوانتموی در پایتون) به دست می‌آید مقایسه می‌نماییم. نتایج به دست آمده از بسط چبیشف به خوبی با نتایج پکیج کیوتیپ همخوانی دارند. همچنین جهت بررسی کمی دقیق نتایج خود به ازای پارامترهای مختلف خطای سیستم را نیز محاسبه و مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

مقدّمه

همدوسی کوانتمی اساس تکنولوژی‌های کوانتمی مانند رمزنگاری کوانتمی، عکسبرداری کوانتمی، فرابرد کوانتمی و کامپیوتراهای کوانتمی است که باعث به وجود آمدن پدیده‌های غیر کلاسیکی نظیر درهمتندگی و تداخل می‌شود؛ اما فقط سامانه‌های کوانتمی ایده‌آل و منزوی دارای همدوسی کامل هستند. سامانه‌های کوانتمی واقعی همواره با محیط دربرگیرنده خود جفت می‌شوند که در اثر این جفت‌شدنگی، همدوسی از بین می‌رود، که به این فرآیند واهمدوسی^۱ گفته می‌شود. مطالعه واهمدوسی کوانتمی می‌تواند اطلاعات مفیدی از محیط در برگیرنده سامانه‌های کوانتمی به ما داده و در نتیجه زمینه پیشرفت فناوری‌های کوانتمی را فراهم آورد[۱].

مطالعه تحلیلی واهمدوسی کوانتمی معمولاً کار دشواری است. به همین منظور از روش‌های عددی برای مطالعه آن استفاده می‌کنند. هر کدام از روش‌های عددی نیز مزیت و معایبی دارند. این روش‌ها از نظر سرعت و شرایط قابل استفاده و دقت بسیار باهم تفاوت دارند و باید با توجه به شرایط مسئله در دست، یکی از روش‌های عددی را برگزید. به عنوان مثال، می‌توان به دو روش سوزوکی-تراتر^۲ و روش بسط چبیشف^۳، اشاره کرد. برای مسئله‌ی میرایی نوسانات کوانتمی می‌توان نشان داد که روش چبیشف، چهار بار سریع‌تر از روش سوزوکی-تراتر به جواب می‌رسد[۲].

در فصل اول این گزارش، چند جمله‌ای‌های چبیشف را معرفی می‌کنیم و با استفاده از آن بسط چبیشف و ضرایب آن را به دست می‌آوریم. در فصل دوم، با همدوسی کوانتمی آشنا می‌شویم و سامانه اسپین مرکزی را مدل سازی می‌کنیم؛ و در فصل سوم، روش چبیشف را برای مسئله‌ی میرایی نوسانات کوانتمی یک سامانه اسپین مرکزی بررسی می‌کنیم.

¹decoherence

²Suzuki-Trotter

³Chebyshev Expansion

فصل ۱

چندجمله‌ای‌های چبیشف

با روش‌های ریاضی می‌توان هر پدیده را بر حسب یک سری از توابع پایه (مثلثاتی یا چندجمله‌ای) مانند $f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j p_j(x)$ با دقت مناسب تقریب زد.

اما این که چه پدیده‌ای را با چه نوع تابعی تقریب بزنیم کاملاً بستگی به رفتار آن پدیده دارد که به کدام نوع تابع پایه نزدیک‌تر است. مناسب بودن یک سری از توابع پایه نسبت به یک سری دیگر بدين معنا است که می‌توان در تعداد جملات کمتری از سری به دقت دلخواه رسید. با این تفسیر از آنجا که p_n ‌ها خود چندجمله‌ای‌های هستند، و چندجمله‌ای‌ها تابع نیز هستند، بهترین توابع پایه برای تقریب آن‌ها چندجمله‌ای‌های دیگری خواهد بود، بنابراین می‌توان از روش‌های تقریب چندجمله‌ای استفاده کرد.

از جمله کاربردهای چندجمله‌ای‌ها می‌توان به تقریب توابع در آنالیز عددی، معادله مشخصه ماتریس‌هادر جبر خطی و تعیین رنگ در رنگ آمیزی گراف، اشاره کرد. سوالی که اینجا مطرح می‌شود این است که هدف از تقریب یک تابع به یک چندجمله‌ای چیست؟

پاسخی که به این سوال داده می‌شود این است که انتگرال‌گیری و مشتق‌گیری چندجمله‌ای‌ها به مرتب ساده‌تر از توابع است، هم‌چنین کامپیوتور می‌تواند آن‌ها را به‌طور دقیق ارزیابی و مقداردهی کرده و عملیات مورد نیاز روی آن‌ها را ساده‌تر انجام دهد.

بنابر نظریه وایرشتراس^۱ هر تابع پیوسته در بازه $[a, b]$ را می‌توان به صورت یکنواخت و با دقت دلخواه با یک چندجمله‌ای تقریب زد.^۲

البته خود چندجمله‌ای‌ها نیز از این قاعده مستثنی نیستند و با استفاده از این مطلب می‌توان نتیجه‌گرفت که یک چندجمله‌ای مرتبه بالا را در بازه‌های کوچکتری از دامنه تعریف‌شان می‌توان

¹Weierstrass

با استفاده از چندجمله‌ای مرتبه پایین تقریب زد، که استفاده از این چندجمله‌ای مرتبه پایین باعث تسريع محاسبات خواهد شد.

در این فصل قصد داریم تا با یکی از این روش‌های تقریب زدن به نام چندجمله‌های چبیشف آشنا شویم. چندجمله‌ای‌های چبیشف به دو نوع اول و دوم دسته‌بندی می‌شوند که فقط به نوع اول آن می‌پردازیم.

۱.۱ تعاریف اولیه

قبل از معرفی این روش تعاریف مورد نیاز اولیه را بیان می‌کنیم.

تعریف ۱ تابع وزن‌دار

تابع انتگرال پذیر $\omega(x)$ را روی بازه $[a, b]$ یک تابع وزن‌دار گوییم اگر برای هر $x \in [a, b]$ باشد، اما روی هر زیر بازه از $[a, b]$ $\omega(x) \neq 0$ باشد.

تعریف ۲ چندجمله‌ای‌های متعامد

چندجمله‌ای‌های متعامد، رده‌هایی از چندجمله‌ای‌ها مانند $p_n(x)$ هستند که روی بازه $[a, b]$ تعریف می‌شوند و برای آن‌ها رابطه زیر صادق است،

$$\int_a^b \omega(x) p_m(x) p_n(x) d(x) = \delta_{mn} \quad (1-1)$$

که در آن $\omega(x)$ یک تابع وزن‌دار و $\delta_{m,n}$ دلتای کرونیکر است.

۲.۱ چندجمله‌ای‌های چبیشف نوع اول

چندجمله‌ای‌های چبیشف نوع اول، مجموعه‌ای از چندجمله‌ای‌های متعامد هستند، که به صورت زیر تعریف می‌شوند.

تعریف ۳ چندجمله‌ای چبیشف نوع اول

چندجمله‌ای چبیشف نوع اول از درجه‌ی n بر بازه $[1, -1]$ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$T_n(x) = \cos(n \cos^{-1} x) \quad (1-2)$$



با توجه به تعریف (۳) هر چندجمله‌ای چبیشف در رابطه بازگشتی زیر صدق می‌کند.

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \dots \quad (1-3)$$

برای اثبات کافیست از روابط زیر شروع کنیم

$$\begin{aligned} \cos(n+1)\theta &= \cos n\theta \cos \theta - \sin n\theta \sin \theta \\ \cos(n-1)\theta &= \cos n\theta \cos \theta + \sin n\theta \sin \theta \end{aligned} \quad (1-4)$$

و از جمع این دو رابطه داریم

$$\cos(n+1)\theta = 2 \cos n\theta \cos \theta - \cos(n-1)\theta \quad (1-5)$$

با توجه به تعریف چندجمله‌ای چبیشف درجه n , اگر قرار دهیم $\theta = \cos^{-1} x$, پس در نتیجه برای $n \geq 1$ داریم

$$T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) = \cos(n+1)\theta + \cos(n-1)\theta = 2 \cos n\theta \cos \theta = 2xT_n(x) \quad (1-6)$$

بنابراین رابطه بازگشتی زیر برقرار است

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x). \quad (1-7)$$

تعدادی از چندجمله‌ای‌های چبیشف نوع اول به صورت زیر هستند.

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1 \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x \end{aligned} \tag{۱-۸}$$

توجه می‌کنیم که $T_n(x)$ یک چندجمله‌ای درجه n است و با استقرار نشان داده می‌شود که ضریب x^n (بزرگ‌ترین توان) در آن 2^{n-1} است. به عبارتی

$$T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \text{terms of lower degrees} \tag{۱-۹}$$

برای سهولت در کار با چندجمله‌ای‌ها، توجه می‌کنیم که چندجمله‌ای‌های چبیشف تعریف شده روی بازه دلخواه $[a, b]$ را می‌توان به چندجمله‌ای چبیشف روی بازه $[-1, 1]$ تبدیل کرد. چندجمله‌ای چبیشف $T_n(t)$ را در بازه $-1 \leq t \leq 1$ در نظر بگیرید. تبدیل خطی زیر را در نظر بگیرید

$$x = \frac{(b-a)t}{2} + \frac{b+a}{2}, \quad -1 \leq t \leq 1 \tag{۱-۱۰}$$

این تبدیل بازه‌ی $[a, b]$ از محور x را به بازه‌ی $[-1, 1]$ از محور t نقش می‌کند، و برعکس. اکنون فرض کنید $T_n(t)$ چندجمله‌ای چبیشف بر بازه $-1 \leq t \leq 1$ باشد. چندجمله‌ای $\tilde{T}_n(x)$ را بر بازه $[a, b]$ به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\tilde{T}_n(x) = T_n\left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right), \quad n = 0, 1, \dots \tag{۱-۱۱}$$

بنابراین

$$\begin{aligned}\tilde{T}_\circ(x) &= T_\circ(t) = 1 \\ \tilde{T}_1(x) &= T_1(t) = t = \frac{2x-(a+b)}{b-a} \\ \tilde{T}_2(x) &= T_2(t) = 2t^2 - 1 = 2 \left[\frac{2x-(a+b)}{b-a} \right]^2 - 1\end{aligned}\quad (1-12)$$

۳.۱ بسط چبیشف

اکنون تابع $f(x)$ که در آن $1 \leq x \leq 1$ است را در نظر می‌گیریم. این تابع را می‌توان با استفاده از چندجمله‌ای‌های چبیشف به صورت زیر بسط داد. [۴]

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n T_n(x) \quad (1-13)$$

که در آن $T_n(x)$ چندجمله‌ای‌های چبیشف نوع اول، از درجه n هستند. همچنین ضرایب c_n با استفاده از خاصیت متعامد بود چندجمله‌ای‌ها به دست آورد.

$$c_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_0(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad (1-14)$$

و

$$c_n = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad ; n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-15)$$

در فصل‌های آینده با استفاده از بسط چبیشف، یک سامانه اسپین مرکزی کلی را مدل سازی کرده و نتایج به دست آمده از آن را تحلیل می‌کنیم.

فصل ۲

مدل‌سازی سامانه اسپین مرکزی

۱.۲ واهمدوسی

تحولات دینامیکی یک سامانه کوانتومی ناشی از همبستگی کوانتومی (درهم‌تنیدگی) بین آن سامانه مرکزی و محیط اطراف آن (انباره) را واهمدوسی کوانتومی می‌گویند.

به عنوان مثال، یک کامپیوتر کوانتومی برای اینکه بتواند تعداد زیادی از عملیات‌های دروازه‌های منطقی کوانتومی را انجام دهد، نیازمند تعداد بسیار زیادی کیوبیت (در حدود 10^6 کیوبیت[۲]) است. ساخت و استفاده از یک کامپیوتر کوانتومی با چنین ویژگی‌هایی در عمل بسیار دشوار است؛ زیرا یک سامانه کوانتومی دوترازی، متفاوت از یک کیوبیت ایده‌آل عمل می‌کند. به دلیل برهمنکنش سامانه با محیط اطراف خود، روابط فازی بین ترازهای مختلف کامپیوتر کوانتومی از بین می‌رود (واهمدوسی) و در نتیجه نرخ خطاب به سرعت افزایش می‌یابد. واهمدوسی را می‌توان به صورت از دست دادن اطلاعات به محیط اطراف نیز تعبیر کرد. در این نوع تعبیر رفتار دینامیکی واهمدوسی در سامانه‌های باز به دو رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی دسته‌بندی می‌شود. رژیم مارکوفی به فقدان «اثر حافظه» در سامانه‌های کوانتومی مربوط می‌شود. در این رژیم اطلاعات موجود در یک سیستم کوانتومی به طور برگشت ناپذیری از سامانه به محیط شارش می‌یابد. در مقابل، رژیم غیر مارکوفی به وجود اثر حافظه در سامانه‌های کوانتومی اشاره دارد. در چنین رژیمی، گذشته‌ی یک سامانه می‌تواند بر رفتار کنونی آن تاثیر بگذارد؛ بدین طریق که اثر حافظه باعث می‌شود تا اطلاعات شارش یافته از سامانه به محیط، دوباره از محیط به سامانه برگردد. مانندگاری اثرات حافظه در رژیم غیرمارکوفی منجر به احیای دوباره منابع کوانتومی موجود در سامانه‌های کوانتومی نظیر همدوسی کوانتومی، درهم‌تنیدگی و ناسازگاری

کوانتموی پس از نابودی کامل می‌شود. اگر چه این احیاها می‌توانند زمان استفاده از منابع کوانتموی را اندکی طولانی‌تر کنند، اما سرانجام از بین می‌روند. تحقیق کامپیوترهای کوانتموی نیازمند در دست داشتن متابع کوانتموی با طول عمر بالا است که با مطالعه دقیق و احمدوسی می‌توان به آن رسید.^[۵]

در حالت کلی‌تر، و احمدوسی یک پدیده بس‌ذره‌ای کوانتموی است که اساس کار بسیاری از شاخه‌های مکانیک کوانتموی است. همچنین و احمدوسی نقشی پررنگ در سامانه‌های حالت جامد دارد و می‌تواند باعث سرکوب تونل‌زنی کوانتموی در کریستال‌ها و یا تونل‌زنی اسپینی در نانوذرات و مولکول‌های مغناطیسی شود. و احمدوسی در بسیاری از سامانه‌های فیزیکی تاثیرات مشاهده پذیری دارد. و احمدوسی از تداخل کوانتموی جلوگیری می‌کند و باعث می‌شود خواص کلاسیکی دوباره ظهور کنند که در این حالت تکنولوژی‌های کوانتموی دچار مشکل می‌شوند. اما از سوی دیگر، با استفاده از و احمدوسی می‌توان اطلاعات مفیدی راجع به محیط به دست آورد. مطالعه دقیق و احمدوسی می‌تواند در درک بهتر رفتار بسیاری سامانه‌های فیزیکی موثر باشد فرض کنید سامانه مرکزی در حالت اولیه $|\psi_0\rangle$ و محیط در حالت اولیه $|\chi_0\rangle$ قرار دارد. پس سامانه کلی، سامانه مرکزی به اضافه‌ی انباره، در حالت اولیه $|\Psi(t=0)\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |\chi_0\rangle = |\Psi(t=0)\rangle$ قرار می‌گیرد.

با در نظر گرفتن ماتریس چگالی کاهش یافته سامانه مرکزی

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_B |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|, \quad (2-1)$$

که در آن Tr_B به معنای رد^۱ گرفتن بر روی درجات آزادی محیط است، می‌توان ویژگی‌های سامانه مرکزی را بررسی کرد.

در ابتدا ماتریس چگالی به صورت $|\psi_0\rangle\langle\psi_0| = \rho_S(0)$ است که نشان دهنده آن است که سیستم در حالت خالص قرار دارد و $\rho_S(0) = \rho_S^2(0)$ است. در زمان‌های $t > 0$ این خاصیت از بین می‌رود و سامانه در حالت مخلوط قرار می‌گیرد. می‌توان این حالت‌های (آنی) سامانه $|q_i(t)\rangle$ و عدد ظرفیت (آنی) این حالت‌ها $w_i(t)$ را با استفاده از قطری سازی ماتریس چگالی بدست آورد. می‌توان فرض کرد که حالت‌های $|q_i(t)\rangle$ به سرعت به یک سری حالت‌های حدی $|p_i\rangle$ که به آن‌ها حالت‌های اشاره^۲ می‌گویند، میل می‌کنند.

¹Trace

²Pointer State

بررسی نظری واهمدوسی کوانتوسی، تغییرات سامانه مرکزی از حالت اولیه ψ_0 به حالت مخلوط نهایی و بدست آوردن حالت‌های اشاره $\langle p_i |$ ، جزو مسائل سخت نظریه بس‌ذره‌ای کوانتوسی است. بعضی از مدل‌های ساده را می‌توان با استفاده از روش‌های تحلیلی حل کرد. برای حل مدل‌های پیچیده‌تر می‌توان از روش‌های تقریبی کمک گرفت. یکی از این روش‌های تقریبی، تقریب مارکوف^[۶] برای انباره است که فرض می‌کند تاثیرات حافظه در دینامیک انباره قابل چشم‌پوشی است. یک حالت خاص که در آن محیط شامل نوسانگرهای جفت نشده است (این حالت به انباره بوزون معروف است) نیز علی‌الاصول به صورت نظری کاملاً حل شده است. با اینکه مدل انباره بوزونی برای بسیاری از انواع محیط‌ها قابل استفاده است، اما همه را شامل نمی‌شود.

یکی از حالت‌های مهمی که مدل انباره بوزونی نمی‌تواند توصیف کند، واهمدوسی ایجاد شده توسط محیطی متشكل از اسپین‌هاست (این حالت به انباره اسپین معروف است). همچنین واهمدوسی به وجود آمده توسط سامانه‌های دوترازی دیگر را هم می‌توان به صورت انباره اسپین مطرح کرد. بررسی تحلیلی واهمدوسی کوانتوسی انباره اسپین دشوار است. به همین منظور برای بررسی چنین سامانه‌هایی از روش‌های عددی کمک می‌گیریم.

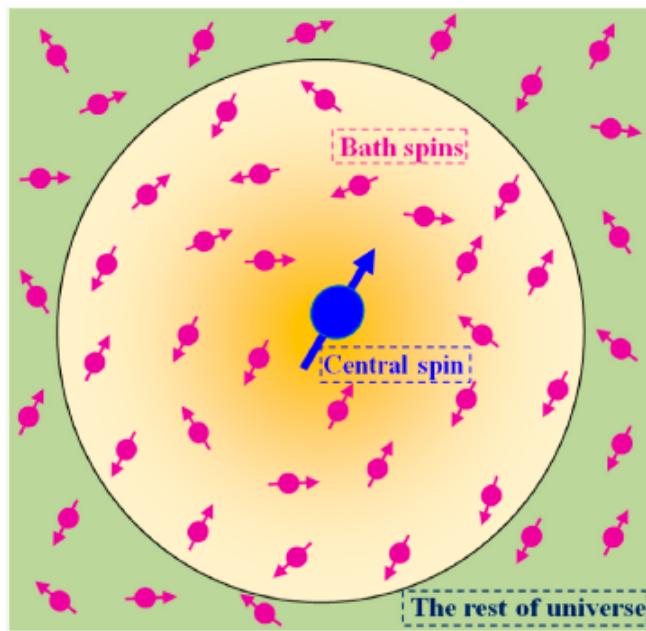
۲.۲ مدل‌سازی انباره اسپین

از آن جایی که یک کیوبیت را می‌توان معادل ذره‌ای با اسپین کوانتوسی $1/2$ نشان داد و کامپیوترهای کوانتوسی متشكل از تعداد زیادی کیوبیت هستند؛ و همچنین از آن جایی که در فیزیک حالت جامد با مسائلی مواجه می‌شویم که اسپین $1/2$ در آن‌ها دیده می‌شود (چرا که الکترون ذره‌ای با اسپین $1/2$ است)، پس واهمدوسی کوانتوسی سامانه‌ای متشكل از تعدادی اسپین‌های جفت شده $1/2$ را مورد بررسی قرار می‌دهیم. روش توضیح داده شده در این گزارش را می‌توان برای ذرات با اسپین‌های بالاتر نیز تعمیم داد.

فرض می‌کنیم سامانه مرکزی متشكل از M اسپین جفت شده $S_m = 1/2$ ($m = 1, \dots, M$) است. این اسپین‌ها با انباره‌ای از اسپین‌ها، متشكل از N اسپین محیطی I_n ($n = 1, \dots, N$ ، $I_n = 1/2$)، برهمنکنش می‌کنند.

همیلتونی سامانه کل (سامانه مرکزی به علاوه‌ی انباره اسپین) به صورت

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B + \mathcal{V} \quad (2-2)$$



شکل ۱۰.۲ – شمای یک سامانه اسپین مرکزی. اسپین آبی رنگ، سامانه مرکزی و اسپین‌های صورتی رنگ، اسپین‌های انباره هستند.

است؛ که در آن \mathcal{H}_S و \mathcal{H}_B به ترتیب، همیلتونی خالص سامانه مرکزی و انباره؛ و \mathcal{V} نیز برهمنکش بین سامانه مرکزی و انباره است.
در این گزارش، شبیه‌سازی‌های خود را با استفاده از این فرم کلی همیلتونی انجام داده‌ایم:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_S &= \sum_{\langle m, m' \rangle} \sum_{\alpha=x,y,z} J_{mm'}^\alpha S_m^\alpha S_{m'}^\alpha + \sum_m \sum_{\alpha=x,y,z} H_m^\alpha S_m^\alpha, \\ \mathcal{H}_B &= \sum_{\langle n, n' \rangle} \sum_{\alpha=x,y,z} \Gamma_{nn'}^\alpha I_n^\alpha I_{n'}^\alpha + \sum_n \sum_{\alpha=x,y,z} H_n^\alpha I_n^\alpha, \\ \mathcal{V} &= \sum_{\langle m, n \rangle} \sum_{\alpha=x,y,z} A_{mn}^\alpha S_m^\alpha I_n^\alpha. \end{aligned} \quad (2-3)$$

فرض می‌کنیم همیلتونی وابستگی به زمان نداشته باشد و تمام ثابت‌های برهمنکش^۱، J ، Γ و A در طول زمان ثابت هستند. مطالعه تحلیلی دینامیک مدل تعریف شده توسط رابطه (۲-۲) بسیار دشوار است؛ و برای حالت کلی همیلتونی، بدون داشتن اطلاعات اولیه از سامانه کلی، تنها راه حل، حل عددی معادله شرودینگر وابسته به زمان این سامانه است. به همین منظور، حالت‌های پایه برای فضای هیلبرت سامانه کلی را انتخاب می‌کنیم. ساده‌ترین انتخاب، حاصل ضرب حالت‌های $\langle \uparrow |$ و $\langle \downarrow |$ برای هر کدام از اسپین‌های S_m و I_n است. حالت اولیه سامانه کلی

^۱Exchange Interaction Constants

را بر اساس این پایه‌ها به صورت Ψ_0 نشان می‌هیم. معادله شرودینگر به صورت زیر خواهد بود.

$$id\Psi(t)/dt = \mathcal{H}\Psi(t) \quad (2-4)$$

رابطه (۲-۴) دستگاهی مشکل از معادلات دیفرانسیل معمولی نوع اول با شرایط اولیه $\Psi(t=0) = \Psi_0$ است.

طول بردار Ψ ، 2^{M+N} است. به عنوان نمونه، برای مقادیر $N = 20$ و $M = 2$ باید تعداد 4×10^6 معادله دیفرانسیل حل کرد. در بخش بعد نشان خواهیم داد که چطور با استفاده از بسط چبیشف می‌توان معادله (۲-۴) را به صورت عددی حل کرد.

۳.۲ بررسی و احمدوسی انباره اسپین با استفاده از بسط چبیشف

برای یک همیلتونی مستقل از زمان، جواب معادله (۲-۴) به صورت زیر است

$$\Psi(t) = \exp(-it\mathcal{H})\Psi_0 = U(t)\Psi_0, \quad (2-5)$$

که در آن $U(t)$ عملگر تحول زمانی است. یک روش موثر برای محاسبه تابع نمایی ماتریس \mathcal{H} ، بسط آن به وسیله چندجمله‌های چبیشف عملگر \mathcal{H} است.

همانطور که در فصل اول گفته شد، چندجمله‌ای‌های چبیشف (رابطه ۱-۲) در بازه $[-1, 1]$ تعریف می‌شوند. به همین خاطر ابتدا باید مقیاس همیلتونی را به اندازه E_0 (بازه‌ی مقادیر انرژی سامانه) تغییر و سپس آن را به اندازه E_c (مقدار میانه انرژی سامانه) انتقال داد.

$$\begin{aligned} E_c &= \frac{1}{2} (E_{\max} + E_{\min}), & E_0 &= E_{\max} - E_{\min} \\ E_{\min} &= \min \langle \mathcal{H} \rangle = \min_{\langle \Phi | \Phi \rangle = 1} \langle \Phi | \mathcal{H} | \Phi \rangle & (2-6) \\ E_{\max} &= \max \langle \mathcal{H} \rangle = \max_{\langle \Phi | \Phi \rangle = 1} \langle \Phi | \mathcal{H} | \Phi \rangle \end{aligned}$$

در این صورت متغیر جدید $\mathcal{G} = 2(\mathcal{H} - E_c)/E_0$ جایگزین همیلتونی می‌شود که محدود به $[-1, 1]$ است.

با توجه به شکل خاص همیلتونی در نظر گرفته شده در این پژوهش (رابطه ۲-۳) می‌توان مقدار $E_c = 0$ و همچنین

$$E_0 = 2 \max(|E_{\min}|, |E_{\max}|) \quad (2-7)$$

$$-E_0/2 \leq \langle \mathcal{H} \rangle \leq E_0/2$$

را در نظر گرفت. از آنجایی که $\max \langle \mathcal{H} \rangle = \|\mathcal{H}\|$ نرم همیلتونی است، می‌توان مقدار E_0 را با استفاده از نامساوی کوشی آورد.

$$\begin{aligned} \|\mathcal{H}_S\| &\leq \sum_{\langle m, m' \rangle} \sum_{\alpha=x,y,z} |J_{mm'}^\alpha|, \|S_m^\alpha\| \|S_m^\alpha\| \\ &+ \sum_m \sum_{\alpha=x,y,z} |H_m^\alpha| \|S_m^\alpha\| \quad (2-8) \\ &= \sum_{\langle m, m' \rangle} \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{1}{4} |J_{mm'}^\alpha| + \sum_m \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{1}{2} |H_m^\alpha| \end{aligned}$$

به همین ترتیب می‌توان مقادیر $\|\mathcal{H}_B\|$ و $\|\mathcal{V}\|$ را به دست آورد. در نتیجه خواهیم داشت $E_0 \leq E_1$ که در آن

$$\begin{aligned} E_1 &= \sum_{\langle m, m' \rangle} \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{1}{2} |J_{mm'}^\alpha| + \sum_{\langle n, n' \rangle} \frac{1}{2} |\Gamma_{nn'}^\alpha| + \sum_{\langle m, n \rangle} \frac{1}{2} |A_{mn}^\alpha| \\ &+ \sum_m |H_m^\alpha| + \sum_n |H_n^\alpha| \quad (2-9) \end{aligned}$$

است و عملگر \mathcal{G} را می‌توان به صورت $\mathcal{G} = 2\mathcal{H}/E_1$ تعریف کرد که همچنان شرط محدود بودن بین بازه $[1, -1]$ را ارضا می‌کند.

با توجه به روابط (۲-۵) و (۱-۱۳) می‌توان عملگر تحول زمانی را به صورت زیر بازنویسی کرد

$$U(t) = \exp(-i\tau\mathcal{G}) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k T_k(\mathcal{G}), \quad (2-10)$$

که در آن $\tau = E_1 t/2$ زمان بهنجار شده است. ضرایب بسط فوق را می‌توان با استفاده از

روابط (۱-۱۴) و (۱-۱۵) به صورت زیر به دست آورد

$$c_k = \frac{a_k}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{T_k(x) \exp(-ix\tau)}{\sqrt{1-x^2}} dx = a_k (-i)^k J_k(\tau), \quad (2-11)$$

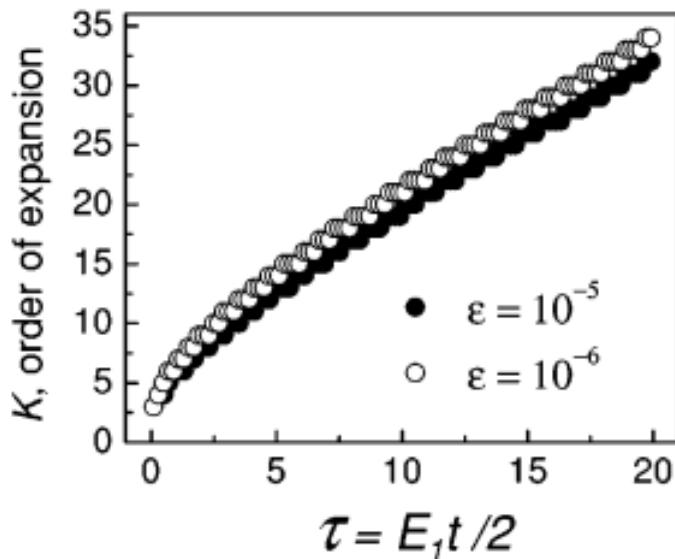
که در آن $J_k(\tau)$ توابع بسل از مرتبه k است و

$$a_k = \begin{cases} 1, & \text{for } k = 0 \\ 2, & \text{for } k \geq 1 \end{cases}$$

هستند. $T_k(k)$ را نیز می‌توان با استفاده از رابطه (۱-۳) به صورت بازگشته

$$T_{k+1}(\mathcal{G}) = 2\mathcal{G}T_k(\mathcal{G}) - T_{k-1}(\mathcal{G}) \quad (2-12)$$

با شروط اولیه $\Psi(t) = \mathcal{G}$ محاسبه کرد. بنابراین برای به دست آوردن بردار $T_0(\mathcal{G}) = 1, T_1(\mathcal{G}) = \mathcal{G}$ کافی است جمله‌های رابطه (۲-۱۰) را با استفاده از رابطه (۲-۱۲) جمع زد. مقدار تابع بسل به صورت نمایی کاهش می‌یابد؛ به همین خاطر با افزایش تعداد جمله‌های بسط می‌توان خطای کاهش داد.



شکل ۲.۰.۲ – بستگی تعداد جمله‌های بسط چبیشف به τ . دایره‌های توخالی نشان دهنده مقدار کمینه ضرایب بسط $\epsilon = 10^{-5}$ و دایره توپر نشان دهنده $\epsilon = 10^{-6}$ است [۲].

در اکثر مسائل با در نظر گرفتن $k = 1.5\tau$ میزان خطای میزان قابل قبولی کاهش داد.

فصل ۳

نتایج شبیه‌سازی

۱.۳ میرایی نوسانات و اهمدوسی اسپین

مسئله مورد بررسی، میرایی نوسانات کوانتومی در سامانه مرکزی متشکل از دو اسپین جفت شده که با محیط برهمنش دارند، می‌باشد. همیلتونی توصیف کننده سامانه و انباره به صورت خاص زیر در نظر گرفته شده است که به مدل هایزنبرگ همسانگرد معروف است. این مدل برای توصیف بسیاری از پدیده‌ها از جمله فرومغناطیس موفق بوده است.

$$\mathcal{H}_S = J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad \mathcal{H}_B = 0, \quad \mathcal{V} = \sum A_n (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \cdot \mathbf{I}_n, \quad (3-1)$$

می‌باشد. با توجه به محدودیت منابع محاسباتی در دسترس، تعداد اسپین‌های انباره را $N = 6$ در نظر می‌گیریم. ضرایب تبادل $J = 1$ و A_n را به صورت توزیع یکنواخت در بازه $[-0.1, 0]$ در نظر می‌گیریم.

حالت اولیه سامانه اصلی $|\Psi_0\rangle$ ، حاصل ضرب تانسوری حالت اولیه سامانه مرکزی $|\psi_0\rangle$ و حالت اولیه انباره $|\chi_0\rangle$ می‌باشد. در صورتی که حالت اولیه سامانه مرکزی $|\uparrow\downarrow\rangle = |\psi_0\rangle$ باشد، آنگاه اولین اسپین سامانه مرکزی در حالت

$$S_1^z(t=0) = +1/2, \quad (3-2)$$

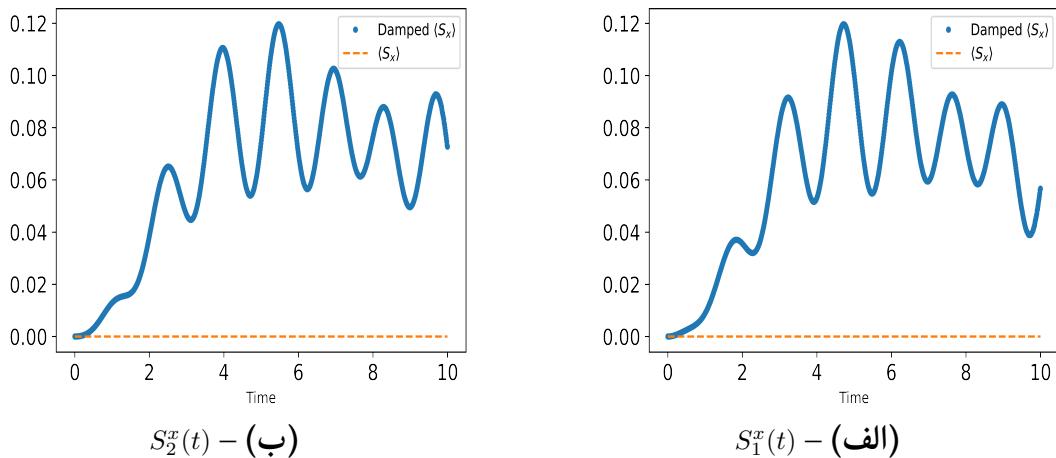
دومین اسپین سامانه مرکزی در حالت

$$S_2^z(t=0) = -1/2, \quad (3-3)$$

قرار خواهد گرفت. حالت اولیه انباره $\langle \chi_0 |$ را برای ایجاد شباهت با یک سیستم گرمایی و مطالعه نویز ناشی از آن، به صورت برهمنهی خطی از تمام حالت‌های پایه با ضرایب تصادفی، در بازه $[0, 1]$ ، با شرط

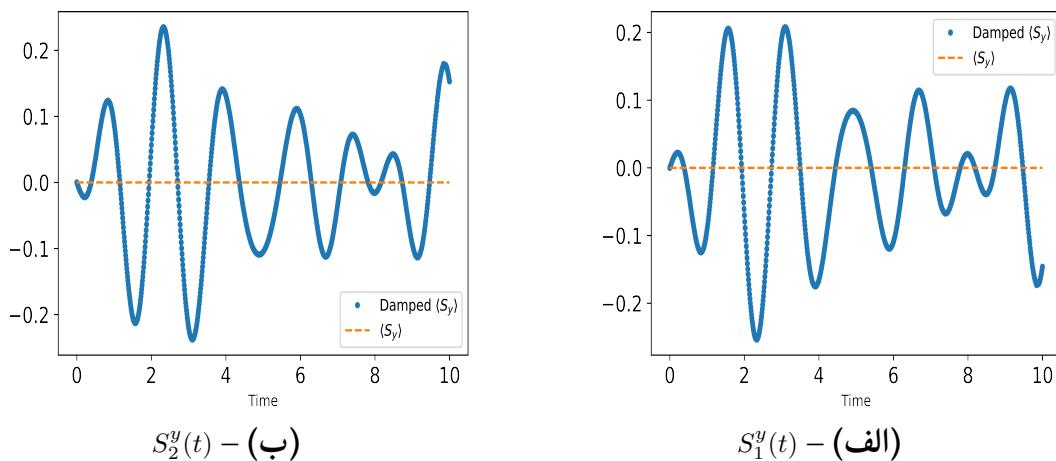
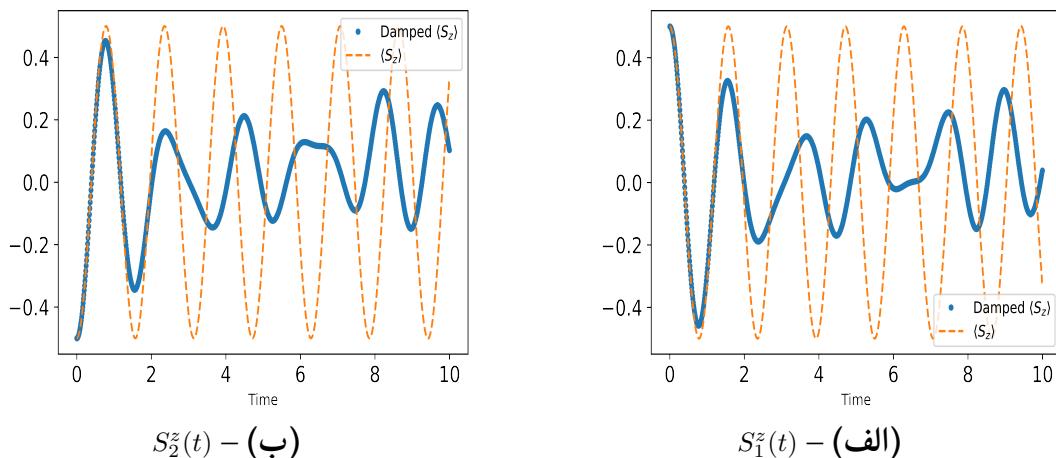
$$\sum_i \alpha_i^2 = 1, \quad (3-4)$$

در نظر می‌گیریم. حالت اولیه سامانه مرکزی یک برهمنهی از دو ویژه مقدار همیلتونی، حالتی با اسپین کلی $S = 1$ و $S_z = 0$ و حالتی با اسپین کلی $S = 0$ است. این حالت‌ها انرژی‌های مختلفی دارند و به عنوان مثال، دینامیک $S_1^z(t=0)$ توسط نوساناتی با فرکانس J نشان داده می‌شود. به دلیل برهمنش سامانه مرکزی با انباره اسپین، این نوسانات میرا می‌شوند. در اشکال زیر این نوسانات میرا برای $S^y(t)$ ، $S^x(t)$ و $S^z(t)$ اسپین اول و دوم سامانه مرکزی در هنگام اندرکش با انباره و برای حالتی که هیچ اندرکشی با انباره ندارند، رسم شده‌اند.



شکل ۱.۳ – نوسانات مقدار چشم داشتی $S^z(t)$ ، $S^y(t)$ و $S^x(t)$.

حد بالای بسط چیزیف در این مسئله خاص، $\kappa = 200$ در نظر گرفته شده است. همچنین مقادیر انتخاب شده برای ضرایب پایه و ثابت‌های برهمنش در کد پایتون پیوست شده، آمده‌اند.

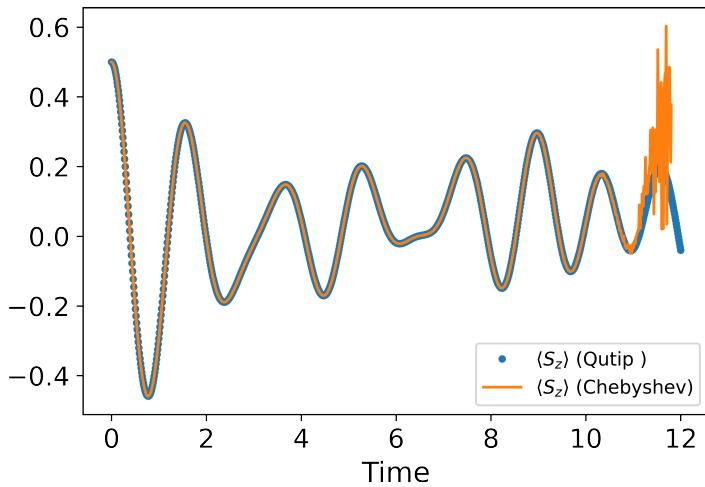
شکل ۲.۳ - نوسانات مقدار چشم داشتی $S^z(t)$, $S^y(t)$ و $S^x(t)$ شکل ۳.۰.۳ - نوسانات مقدار چشم داشتی $S^z(t)$, $S^y(t)$ و $S^x(t)$

Qutip ۲.۳

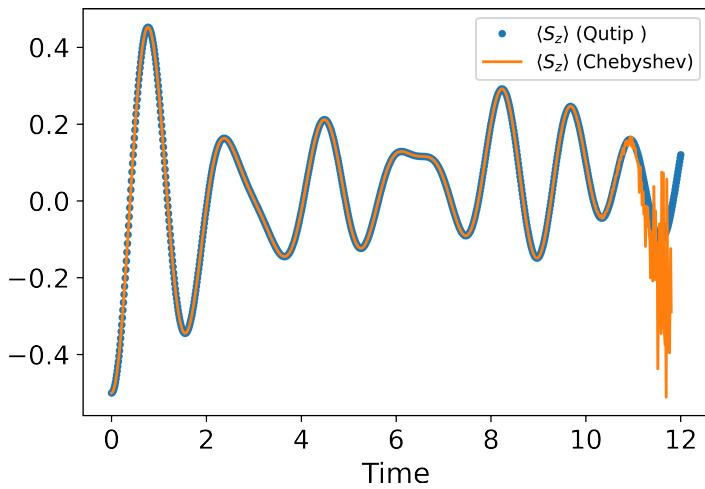
کیوتیپ^۱ یک کتابخانه متن باز برای زبان برنامه‌نویسی پایتون است که از آن برای شبیه‌سازی سامانه‌های کوانتومی استفاده می‌کنند. یکی از قابلیت‌های این کتابخانه، حل معادله شرودینگر است.

در نمودارهای زیر، سامانه توضیح داده شده در رابطه (۲-۱) را با استفاده از کیوتیپ حل کل کرده‌ایم و مقادیر $S_z(t)$ به دست آمده را با روش چبیشف مقایسه کرده‌ایم. همانطور که مشخص است، حل کیوتیپ دقیق بالاتری دارد و اگر حد بالای بسط چبیشف

¹Qutip



شکل ۴.۳ – مقایسه نوسانات مقدار چشم داشتی $S_1^z(t)$ به دست آمده از کیوتیپ با روش چبیشف.



شکل ۵.۳ – مقایسه نوسانات مقدار چشم داشتی $S_2^z(t)$ به دست آمده از کیوتیپ با روش چبیشف.

را افزایش ندهیم، از یک زمانی به بعد، جواب قابل قبولی نخواهیم گرفت.

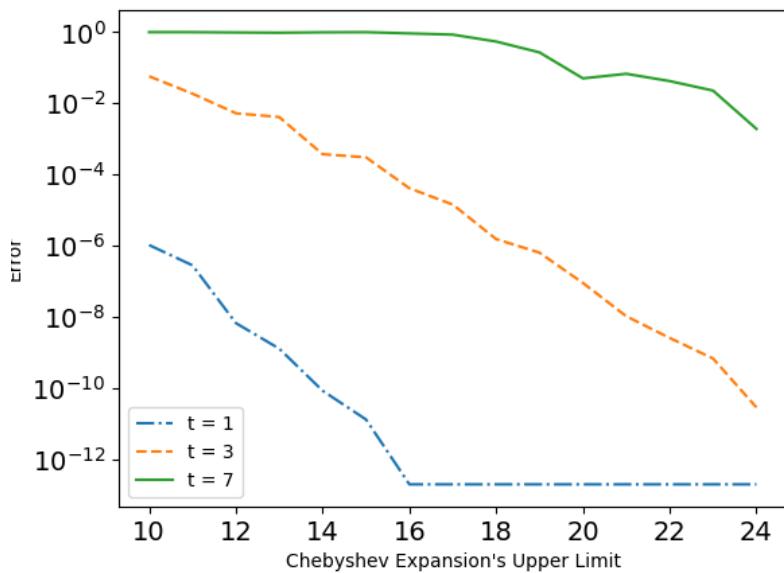
۳.۳ میزان خطأ

دقت بسط چبیشف توسط حد بالای آن مشخص می‌شود. هر چه تعداد جملات بسط بیشتر باشد، دقت افزایش می‌یابد. در مدلی که ساختیم و همانطور که در فصل دوم گفته شد، معمولاً با در نظر گرفتن حد بالای بسط $\kappa = 1.5\tau$ ، میزان خطأ قابل قبول است.

میزان خطای مدل را می‌توان به صورت زیر سنجید. اصل روش استفاده از این واقعیت

است که حاصل ضرب عملگر تحول زمانی در همیوغ مختلط آن باید واحد شود. به همین منظور، باید زمان و حد بالای بسط چبیشف را طوری انتخاب کنیم که این حال ضرب همواره واحد باشد.

برای کمی کردن میزان خطای در این روش، مقدار دترمینان ماتریس عملگر تحول زمانی را محاسبه و از یک کم می‌کنیم. برای این کار یک بار زمان را ثابت در نظر گرفتیم و حد بالا را تغییر دادیم؛ که نمودار خطای آن به صورت زیر است.

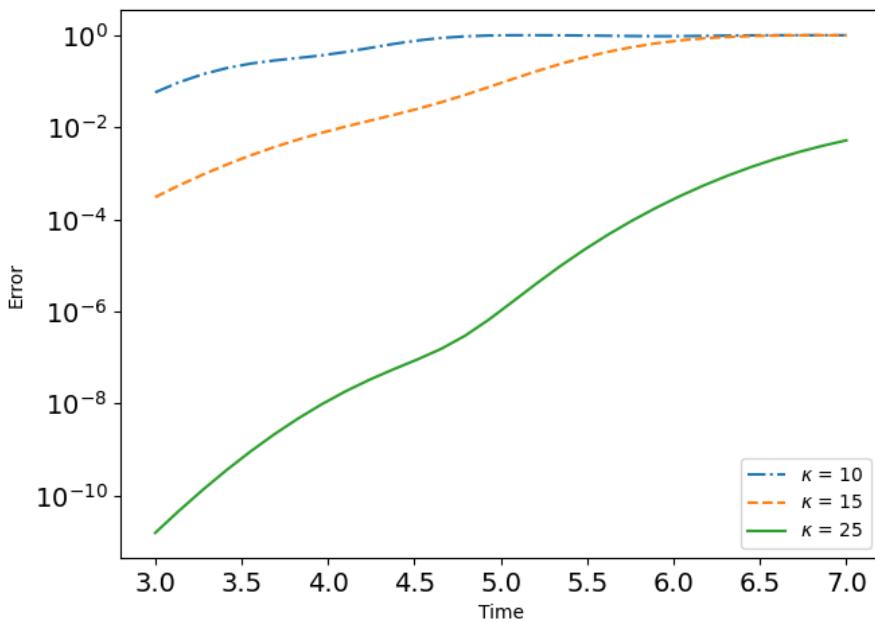


شکل ۶.۳ – میزان خطای عملگر تحول زمانی برای زمان ثابت و حد بالای بسط چبیشف متغیر

بار دیگر حد بالای بسط چبیشف را ثابت در نظر می‌گیریم و زمان را تغییر می‌دهیم. همانطور که مشخص است، حد بالای بسط چبیشف و زمان تاثیر مستقیم در مقدار خطای دارند. هر چه زمان افزایش پیدا می‌کند، باید حد بالای چبیشف نیز به میزان مناسبی افزایش یابد. در بازه زمانی معین، اگر تغییرات حد بالای بسط چبیشف به مقدار قابل توجهی افزایش یابد، تغییرات خطای بسیار ناچیز خواهد بود.

۴.۳ نتیجه گیری

برای مسائلی که حل تحلیلی دشواری دارند، روش‌های حل عددی بسیاری وجود دارند که در این پژوهش به روش بسط چبیشف برای یک سامانه اسپین مرکزی پرداختیم. پاسخ‌های



شکل ۷.۳ – میزان خطای عملگر تحول زمانی برای حد بالای بسط چبیشف ثابت و زمان متغیر

به دست آمده از روش بسط چبیشف از دقت خوبی برخوردار بوده و سرعت این الگوریتم نیز قابل قبول است. با مقایسه این روش با روش حلی که در پکیچ کیوبیت موجود است، نتیجه می‌گیریم که دقت این دو روش، برای مسئله خاص مورد بررسی در این پژوهش، مانند یک دیگر بوده؛ اما روش حل کیوتیپ سرعت بالاتری در محاسبات دارد و بدون نیاز به یافتن یک حد بالا به منظور کاهش خطا، تا زمانی که منابع در دسترس به شما اجازه می‌دهند، می‌توانید مسئله را برای تعداد اسپین‌های بیشتر و ماتریس‌های بزرگ‌تر حل کنید.

پیوست الف

کد پایتون

```
from qutip import *
from scipy.special import jv
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import random
from math import sqrt

si = qeye(2)

sx = sigmax()

sy = sigmay()

sz = sigmaz()

m = 2

n = 6

JJ = 1

AA = np.linspace(0, -0.1, n)

E1 = 1 / 2 * sum(AA) + 1 / 2 * JJ

t = 2

tau = E1 * t / 2
```

```

kappa = 200

def super_nums(s_range, e_range, iteration):
    nums = []
    random_sum = random.uniform(s_range, e_range)
    nums.append(random_sum)
    random_sum = random_sum ** 2
    for i in range(iteration - 2):
        ee_range = float(e_range - random_sum)
        new_random = random.uniform(s_range, ee_range)
        random_sum += new_random ** 2
        nums.append(new_random)
    new_random = sqrt(e_range - random_sum)
    nums.append(new_random)
    return nums

def spin_op(N):
    Sx = []
    Sy = []
    Sz = []

    for n in range(N):
        x_list = []
        y_list = []
        z_list = []

        for m in range(N):
            x_list.append(si)
            y_list.append(si)
            z_list.append(si)

        x_list[n] = sx
        y_list[n] = sy
        z_list[n] = sz

        Sx.append(tensor(x_list))
        Sy.append(tensor(y_list))
        Sz.append(tensor(z_list))

    return [Sx, Sy, Sz]

def hamiltonian():
    Sx, Sy, Sz = spin_op(m + n)
    V = 0

```

```

HS = JJ * Sz[0] * Sz[1] + JJ * Sx[0] * Sx[1] + JJ * Sy[0] * Sy[1]
for i in range(2, n + m):
    V += (
        AA[i - 2] * (Sz[0] + Sz[1]) * Sz[i]
        + AA[i - 2] * (Sy[0] + Sy[1]) * Sy[i]
        + AA[i - 2] * (Sx[0] + Sx[1]) * Sx[i]
    )

HH = V + HS
return HH

HH = hamiltonian()
G = 2 * HH / E1
TG_list = [1, G]
a = TG_list[0]
b = TG_list[1]
for i in range(1000):
    c = (2 * G * b) - a
    a = b
    b = c
TG_list.append(b)

def evo(tau, kappa):
    UU = 0
    for k in range(int(kappa) + 1):
        a = 2
        if k == 0:
            a = 1
        UU += a * ((-1j) ** k) * jv(k, tau) * TG_list[k]
    return UU

zero = basis(2)
c = create(2)
one=c*zero
chi = Qobj(np.array(super_nums(0,1,64)))
psi_init = tensor(zero,one)
psi0=tensor(psi_init, chi)
ssz = 1/2.0 * sigmaz()
ssx=1/2.0*sigmax()
ssy=1/2.0*sigmay()

qz=[ssz]
for i in range(n+1):
    q.append(qeye(2))

```

```

q = tensor(q)
q = Qobj(q.data)
qx=[ssx]
for i in range(n+1):
    qx.append(qeye(2))
qx = tensor(qx)
qx = Qobj(qx.data)
qy=[ssy]
for i in range(n+1):
    qy.append(qeye(2))
qy = tensor(qy)
qy = Qobj(qy.data)

expect_ops = [qx,qy,qz]
labelss=['x','y','z']
stylee ={'x': '-.', 'y': '--', 'z': '-'}
for ops,l in zip(expect_ops,labelss):
    result = {}
    for i in np.linspace(0,2,1000):
        ttau = E1 * i /2
        uu = evo(HH,E1,kappa,ttau)
        psi = Qobj(uu.data * psi0.data)
        out = psi.dag()*ops*psi
        result[i] = (out[0][0][0].real)
    plt.plot(list(result.keys()), list(result.values()),stylee[l],label=f"${\langle S_{\leftrightarrow}}{l}{\rangle}$")
plt.legend()
plt.xlabel("Time")
plt.savefig("final_three",dpi=1200)
plt.show()

t_list = np.linspace(0,2,1000)
expect_ops = [qx,qy,qz]
result = sesolve(HH, psi0, t_list, expect_ops)

labels = ['x','y','z']
style = {'x': '-.', 'y': '--', 'z': '-'}
for r,l in zip(result.expect,labels):
    plt.plot(t, r, style[l],
    label="${\langle S_{\leftrightarrow}}{c}{\rangle}$ % l)
plt.xlabel("Time", size=15)
plt.legend(fontsize=10)
plt.savefig("sesolve_second",dpi=1200)

```

مراجع

- [1] W. Yang, W. L. Ma, and R. B. Liu, “Quantum many-body theory for electron spin decoherence in nanoscale nuclear spin baths,” *Reports on Progress in Physics*, vol.80, no.1, p.16001, 2017. [1](#)
- [2] V. V. Dobrovitski and H. A. De Raedt, “Efficient scheme for numerical simulations of the spin-bath decoherence,” *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, vol.67, no.5, p.7, 2003. [1](#), [7](#), [13](#)
- [3] W. Rudin. *Functional Analysis*. 1973. [2](#)
- [4] N. Patanarapeelert and V. Varnasavang, “Comparison study of series approximation and convergence between chebyshev and legendre series,” *Applied Mathematical Sciences*, vol.7, no.65-68, pp.3225–3237, 2013. [6](#)
- [5] I. De Vega and D. Alonso, “Dynamics of non-Markovian open quantum systems,” *Reviews of Modern Physics*, vol.89, no.1, 2017. [8](#)
- [6] X. Yi, C. Zhang, and D. Wang, “Dynamics of the dissipative two-state system,” *Guangxi Xuebao/Acta Photonica Sinica*, vol.26, no.9, pp.770–776, 1997. [9](#)
- [7] T. Rivlin. *Chebyshev polynomials*. 1990.