

半导体核磁共振显微压力的质子全自旋量子门的实现*

任 韧^{1)†} 徐 进^{1)‡} 任大男²⁾

1)(西安交通大学理学院物理系, 生物医学工程所, 西安 710049)

2)(西北大学数学系, 西安 710069)

(2009 年 12 月 21 日收到; 2010 年 3 月 1 日收到修改稿)

以实现质子全自旋量子门、观察半导体核自旋态和量子计算为目的, 依据样品的自旋-晶格弛豫时间和自旋-自旋弛豫时间, 采用脉冲调制序列控制磁共振的条件和翻转旋转框架, 计算了共振显微压力. 结果表明, 质子全自旋量子门具有高灵敏度和高 Q 操控性, 通过扫描片段和激光干涉可以得到磁共振压力. 共振压力兼具 MRI 和 AFM 优点, 是一种强有力的通过核自旋实现量子计算获得量子信息的有效方法.

关键词: 空间分辨率, 共振显微, 半导体光刻, 电子束刻印

PACC: 7550C, 7320D, 7120C, 7115A

1. 引 言

磁共振压力显微具有三维空间分辨率, 在许多领域都有着广泛的应用, 如非平衡态探索核自旋和极化方向, 高灵敏度传感核量子信息, 量子通信和量子计算^[1-9]. 共振压力显微探头是压力显微和核磁共振成像的结合, 不但对生物蛋白、基因组序、医药、半导体集成、工业催化剂和资源勘探具有重要影响, 而且对新型电子自旋器件、量子器件和量子计算机及光计算机意义重大. 传感器领域核磁压力显微优于 SEM 可以实现三维探测, 是强有力的原子核自旋探测技术和三维原子分辨率成像的有力方法, 有着广阔研究价值和发展前景^[10-12].

从核磁共振到磁共振压力显微, 磁共振压力显微成像技术经历了 50 多年的历程和发展, 磁共振成像 (magnetic resonance imaging MRI), 是继 CT 之后影像成像诊断技术的又一重大进展. 它在磁场强度方面采用静磁场和高频射频磁场结合技术, 使磁场发生了显著变化. 目前, 在高磁场下的磁共振压力成像技术和磁共振成像相关的 RF 脉冲序列、超导

磁体、coil 线圈、高频 THz 信号发生等方面的技术研究发展迅速.

1946 年 Bloch 和 Purcell 发现在外磁场的作用下绕主磁场 (外磁场) 进动的自旋质子在暂态射频电磁波下逐渐增大旋转框架的进动角, 当射频电磁波停止后, 质子又会逐渐恢复到原来的状态, 并同时释放与激励波频相同的射频信号. 1973 年 Lauterbur 通过在主磁场中附加一个梯度磁场, 并逐点诱发三维固体样品的核磁共振谱和电磁波, 经过 Fourier 变换, 计算机处理与图像重构, 重建了二维的磁共振图像. 2004 年 Jenkins 等人构造了一个悬臂的最小弹性常数 10^{-5} N/m, 在实验室液氮下采用超软悬臂磁共振显微已经获得成功. 同时, 2004 年 Pazy 在量子光学上提出了单量子系统的量子跃迁. Powell 通过离子阱, 进行了量子跃迁的统计实验分析. 有别于量子光学实现量子信息, 高灵敏度共振显微探测技术使用磁共振扫描小体积, 目前, 可以扫描到 10^{12} 个原子核自旋共振, 10^7 个电子的自旋共振, 为实现全自旋量子门奠定了基础. 核磁共振成像 (MRI) 结合原子压力显微技术 (AFM) 是有力的探测原子和重构三维原子图像的有效途径, 本文在

* 国家自然科学基金 (批准号: 10775111), 教育部留学科研基金 (批准号: (2009)1001), 西安市科技攻关项目 (批准号: CXY09021) 资助的课题.

† E-mail: renr01@126.com

‡ 通讯联系人. E-mail: xujin10@gmail.com

此基础上,提出了一种在磁共振压力显微探测基础上的全新的读写电子自旋和质子自旋和磁矩的全自旋量子门. 可以用于量子动力学、量子计算和量子信息^[13-20].

2. 原 理 装 置

量子计算和量子信息的磁共振压力显微读出写入关键部件磁探针是一种 SOI 半导体智能成像探测部件. 它通过探针置于静磁场中附加梯度磁场, 射频 Coil 线圈、高频 THz 信号发生装置和 RF 脉冲序列, 扫描自旋样品, 获取质子自旋态的信息. 探针的制备采用半导体硅加工集成技术, 通过微加工, 硅悬臂探针利用硅的各向异性刻蚀. 显微磁场的梯度接近每纳米 2 Gauss, 以保证单个自旋在振荡器上产生的力可以被探测, 理论上大小为 2×10^{-18} N. 在微磁探针下, 场梯度使不同深度的自旋以不同频率共振, 反映自旋量子信息, 同时自旋偏转并产生共振压力, 该方法提供了自旋态受激发和选择定则下的跃迁, 可以进行成像和量子自旋态的读写. 在已有的显微扫描探针技术中, STM 利用电流进行表面形貌及表面电子结构性质研究, 能够直接观察到原子在物质表面的排列状态和与表面电子行为有关的物理化学性质. AFM 通过针尖与样品表面原子存在的微弱的相互作用力造成悬臂弯曲, 得到样品表面的形貌. 典型的产生原子力显微的微悬臂作用力目前有范德华力 (Vander Waals force), 其他还有静电力、磁力、热梯度和光强等. 上述方法中, 共振压力显微装置要求 CoFe 强磁场梯度, 高 Q 值 5000—10000 振荡器及外加高频 RF 场.

实验探针装置读出和写入原理如图 1。

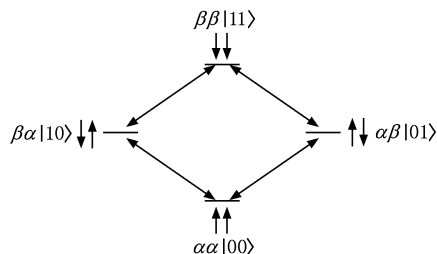


图 1 激发能级和跃迁图, 这里 $|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle$ 代表核磁自旋基态能级, 激发态能级和双激发态

在两个自旋质子上实现的两个激发态核磁跃迁, 自旋方向定义了半导体核磁共振自旋空间取向如图 2. 图中定义了单粒子在两个跃迁下的激发跃

迁图. 对于一个模仿固体, 两个基对应两个比特, 包括基态 $|00\rangle$, 两个有区别的激发态 $|10\rangle, |01\rangle$, 其自旋方向和极化方向正交, $|11\rangle$ 表示双激发态, 自旋磁矩取向平行向下. 0 和 1 代表自旋激发态的缺失和出现, 可以发现核磁共振压力显微探测装置提供了 RF 梯度磁场对自旋方向的调控和改变, 实现了磁矩取向的旋转和自旋矩阵的改变, 容易证明这种改变是基于下述的 RF 核磁脉冲序列控制.

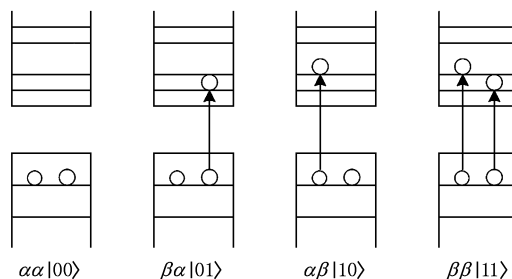


图 2 两个激发能级上实现的跃迁, $|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle$ 代表核磁自旋态能级

磁共振压力显微探针制备根据硅的晶向晶面设计选择刻蚀方向, 腐蚀液选用 TMAH/KOH/氨水. 其中 (111) 面的刻蚀速度低, 在 (110) 取向上硅片形成 U 形槽, (100) 上形成 V 形刻印. 过程使用了 SiO_2 和 SiN 作为阻挡层保护. 综合采用电子束、等离子束光刻及腐蚀液法刻蚀出振荡器探针形状.

3. 结 果 和 讨 论

3.1. 核磁共振显微压力的质子自旋量子门的实现

试验基于 Lamar 共振频率, 在满足 Rf 射频频率等于自旋频率条件下, 通过在反馈电路线圈中电压来传感压力和磁矩物理量. 双光束干涉测量位移并计算压力大小, 进一步通过位移获得反馈电路线圈中电压, 测试原子核磁矩. 电压峰峰值反映位移的激光条纹间距. 硅基底振荡器在双激光束 La 和 Lb 干涉产生信号, 信号是位移 d 的函数. 激光条纹满足

$$2d = \left(n + \frac{1}{2}\right)\lambda, \quad (1)$$

其次, 探测器电压变化与位移关系

$$\left[\frac{dV_s}{dx}\right]_{x=0} = \frac{2\pi}{\lambda} V_{pp}, \quad (2)$$

其中 $V_{pp} = \left[2B\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda/2}x\right)\right]_{x=0}$.

V_{pp} 是峰峰值电压 (相邻条纹最大值), 锁相放大定义满刻度值为 10 V, 真实的位移条纹的探测电压为 $V = V_{Lock} \frac{\text{灵敏度}}{10}$.

3.2. 量子调控两个质子自旋的密度矩阵

相互作用的质子能量和跃迁频率可以通过量子态和跃迁能级计算, 在磁场下质子的不同取向, 反映了不同的自旋对应不同的能量, 自旋可以选择平行以及反平行于外场, 两个耦合的自旋可以构成 2 个 bit, 自旋可以用量子的波函数表示为

$$\begin{aligned}\Psi &= a1(\uparrow\uparrow) + a2(\downarrow\uparrow) + a3(\uparrow\downarrow) + a4(\downarrow\downarrow) \\ &= a1(\alpha\alpha) + a2(\beta\alpha) + a3(\alpha\beta) + a4(\beta\beta) \\ &= a1\varphi1 + a2\varphi2 + a3\varphi3 + a4\varphi4.\end{aligned}\quad (3)$$

自旋的密度矩阵为

$$\begin{aligned}\rho &= \begin{bmatrix} \langle a1a1^* \rangle & \langle a1a2^* \rangle & \langle a1a3^* \rangle & \langle a1a4^* \rangle \\ \langle a2a1^* \rangle & \langle a2a2^* \rangle & \langle a2a3^* \rangle & \langle a2a4^* \rangle \\ \langle a3a1^* \rangle & \langle a3a2^* \rangle & \langle a3a3^* \rangle & \langle a3a4^* \rangle \\ \langle a4a1^* \rangle & \langle a4a2^* \rangle & \langle a4a3^* \rangle & \langle a4a4^* \rangle \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} P & 1Q & 1Q & 2Q \\ 1Q & P & 0Q & 1Q \\ 1Q & 0Q & P & 1Q \\ 2Q & 1Q & 1Q & P \end{bmatrix},\end{aligned}\quad (4)$$

这里 P 代表基态, $1Q$ 为单量子自旋相干态, $0Q$ 代表零量子自旋相干态, $2Q$ 代表双量子自旋相干态. 核磁共振显微自旋可以用 $\rho(t) = U(t - t_0)\rho(t_0)U^{-1}(t - t_0)$ 计算, 对角矩阵的操作 $U(t - t_0) = \exp(iH(t - t_0)/\hbar)$, H 为哈密顿算符.

核磁共振显微对自旋态读写的自旋动力学方程 $H = \frac{1}{2}(p_c^2 + x_c^2) + 2\xi x_c S_z + \varepsilon S_x + \tau(B)S_z$, 其中 P_c 是悬臂振荡器的动量, X_c 是配位键的动量, $x_c S_z$ 为振荡器与自旋作用, εS_x 是自旋和 RF 场作用项, 最后一项为自旋和随机梯度磁场作用.

以一个 $^1\text{H}-^{13}\text{C}$ 作用为例, 计算结果如表 1.

表 1 $^1\text{H}-^{13}\text{C}$ 作用为例, 自旋矩阵计算结果

自旋 No. 1: ^1H				
自旋 No. 2: ^{13}C				
4 × 4 虚对称矩阵	0.00	-0.50	-0.50	0.00
		0.00	0.00	-0.50
			0.00	-0.50
				0.00
4 × 4 实矩阵	0.00	1.00	1.00	0.00
	0.00	0.00	0.00	1.00
	0.00	0.00	0.00	1.00
	0.00	0.00	0.00	0.00
基于自旋系统的	0	0		
自旋编号	自旋的元素	^1H	^{13}C	
	自旋量子数	1/2	1/2	

3.3. 系统的脉冲序列控制

RF 射频控制的磁共振压力系统的脉冲序列是一个循环感应自旋衰减过程, 如图 3 所示. 数据采集在 $\pi/2$ 脉冲后, 表示为 $(\pi \text{ 脉冲} - T_1 - \pi/2 \text{ 脉冲} - (T_R - T_1))_n$, 这里 n 为脉冲重复次数, 自旋系统在 π 脉冲后紧跟一 $\pi/2$ 脉冲构成一次完整的激励, π 脉冲和 $\pi/2$ 脉冲之间的间隔为 T_1 , 每组脉冲间时间间隔为 T_R , 施加 π 脉冲后, 磁化向量 M 从向上自旋的低能级转向向下的高能级, 原子核自旋并没有相位进动. 在 π 脉冲后, 接着施加一 $\pi/2$ 脉冲后, 可以测定 FID 信号, $M(t)$ 曲线测试为 $M(t) = M_0(1 - e^{-t/T_1})$ 获得自旋弛豫时间 T_1 . 自旋-晶格弛豫时间在旋转框架结果为 $T_{1\rho}$. 为了测试磁共振图像信号, 在施加 180° 脉冲 T_1 后, 再加一个 90° 射频脉冲, 就可以测得 FID 信号, 即 $M(t) = M_0(1 - 2e^{-T_1/T_1} + e^{-t/T_1})$, 第一项代表自旋感应衰减与 180° 脉宽时间关系, 第二项代表自由感应衰减 (FID) 与经过脉宽 T_1 后, 纵向磁化向量恢复值间关系. 在倒转恢复激励下核磁共振压力信号强度为 $(1 - 2e^{-T_1/T_1} +$

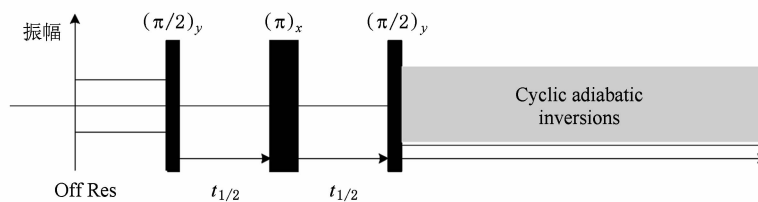


图 3 共振显微压力的质子自旋量子门的 RF 脉冲序列控制

$e^{-\tau/T_1})n$, n 为样品的质子密度. T_R 时间较长, 纵向磁化向量完全恢复, T_1 长的样品产生的信号较强, $t > t_1$, T_1 较小的样品组织比 T_1 长的样品产生要大.

3.4. 核磁显微探针数据的采集, 品质因数 Q 值和倔强系数 K 的测定

核磁显微系统装置中探针直接影响自旋量子门的读出写入, 根据核磁共振压力显微 3D 探头要求, 构建探测装置, 其中包括梯度磁场和悬臂、激光干涉条纹测试系统和核磁显微扫描片断、RF 线圈, 自旋样品以及 X, Y, Z 轴位置调整的压电陶瓷. 测试选择 LOCK IN 记录分析信号电压带宽, 探测相灵敏度, 同步 RF 调制信号和循环 LOCK IN 参考信号. 测试系统进行自旋分类, 判断自旋取向, 采集显微成像压力数据 (如图 4 所示) 和量子计算的量子多态. 进行合适样品的选定, 要求在真空低温室温、自旋 LOCK IN 或饱和循环下均能工作.

核磁显微压力和频率移动特性的测定通过锁定放大、振荡器 Q 值和 K 值的计算获得. K 值的测量设计直接影响压力探测的灵敏度. 降低振荡器探头尺寸, 减小摩擦粘滞系数和热噪声, 可以提高系统测试灵敏度. 为了系统量化和比较 Q, K 和 ω_0 的影响, 测试分析比较了不同带宽、温度 T, Q, K 和 ω_0 下的显微压力.

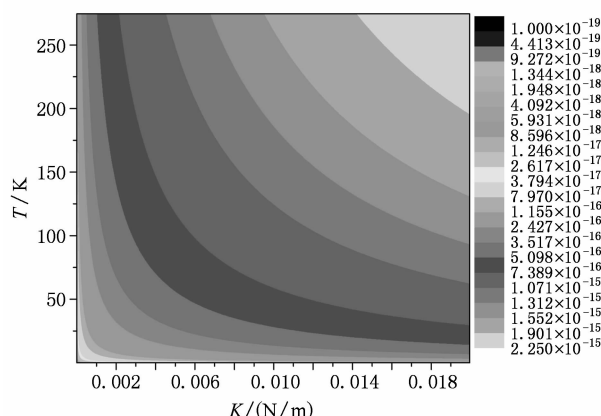


图 4 在低温和软悬臂下, 建模仿真的 2.25×10^{-15} 到 4.092×10^{-18} N 的共振压力

4. 结 论

本文研究了共振显微压力的质子自旋量子门, 通过磁共振压力显微读出写入关键部件磁探针进行量子计算和量子信息研究, 满足共振条件下脉冲序列控制获得自旋磁矩的显微信号压力, 采用显微压力实现量子计算, 进一步进行了核磁共振显微压力的质子自旋量子门探测, 计算获得了显微压力参数, 系统测试兼具 MRI 和 AFM 优点, 突破材料限制, 是一种强有力的探测核自旋和三维原子分辨率成像的有力方法, 并可用于快速读出写入量子自旋态.

- [1] Balatsky A V, Fransson J, Mozyrsky D, Manassen Y 2006 *Physical Review B* **73** 184429
- [2] Stipe B C, Mamin H J, Stowe T D, Kenny T W 2001 *Physical Review Letters* **86** 2874
- [3] Shih H C, William M, Dougherty, Garbini J L, Sidles J A 2004 *Review of Scientific Instruments* **75** 1175
- [4] Zhang Y Q, Zhang S 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4683
- [5] Shao X Q, Wang H F, Chen L 2009 *Optics Communications* **282** 4643
- [6] Monz T, Kim K, Villar A S 2006 *Physical Review Letters* **103** 13
- [7] Shao X Q, Wang H F, Chen L, Zhang S, Yeon K H 2009 *Physics Letters A* **374** 28
- [8] Liu Y S, Liang L M 2009 *Chinese Physics Letters* **26** 100306
- [9] Sleator T, Weinfurter H 1995 *Physical Review Letters* **74** 4087
- [10] Shao X Q, Chen L, Zhang S 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3258
- [11] Zheng S B 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3453
- [12] Lin L H 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1867
- [13] Shao X Q, Chen L, Zhang S 2009 *Chin. Phys. B* **18** 440
- [14] Ghasemi A, Liu X X, Morisako A, Dougherty 2009 *IEEE Transactions on Magnetics* **45** 4420
- [15] Gao X Y, Han N, Zhang X X 2009 *Journal of materials science* **44** 5877
- [16] Liu Y M, Yu Z Y, Yang H B, Huang Y Z, 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5023 (in Chinese) [刘玉敏、俞重远、杨红波、黄永箴 2006 物理学报 **55** 5023]
- [16] Liu Y M, Yu Z Y, Ren X M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 66 (in Chinese) [刘玉敏、俞重远、杨红波、黄永箴 2009 物理学报 **58** 66]
- [17] Habib B, Shayegan M, Winkler R 2009 *Semiconductor Science and Technology* **24** 064002
- [18] Tang Y X, Lin X M, Lin G W 2008 *Chin. Phys. B* **17** 4388
- [19] Sleator T, Weinfurter H 1995 *Physical Review Letters* **74** 4087
- [20] Tang S Q, Zhang D Y, Xie L J 2009 *Chin. Phys. B* **18** 56

An all-proton spin quantum gate in semiconductor spin magnetic resonance force system *

Ren Ren^{1)†} Xu Jin^{1)‡} Ren Da-Nan¹⁾²⁾

1) (*Department of Physics, BME Institute, Xian JiaoTong University, Xian 710049, China*)

2) (*Department of Mathematics, North-West University, Xian 710069, China*)

(Received 21 December 2009; revised manuscript received 1 March 2010)

Abstract

We report on a kind of all-proton spin quantum gate realized by fabric silicon cantilever in a semiconductor spin magnetic resonance microscopy system. In the paper, the Rf pulse sequence control and the spin rotate frame system are adopted according to spin-lattice and spin-spin relaxation times, and the small resonance force, the sensitivity and the spin density matrix are studied. The results show that all-proton spin quantum gates have high Q controlling and detecting sensitivity, and gain the effective force oscillating through the resonance slice and fiber interferometer. The system has advantages of MRI and AFM characteristics. In addition, the calculation indicates that it is powerful tool of magnetic resonance force technology and useful way to achieve quantum computation and quantum information.

Keywords: spatial resolution, resonance microscopy, semiconductor photo etching, EBL fabric

PACC: 7550C, 7320D, 7120C, 7115A

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10775111), Ministry of Education Abroad Foundation of China 2009 (Grant No. (2009)1001), 2009 Xian Science and Technology Foundation (Grant No. CXY09021).

† E-mail: renr01@126.com

‡ Corresponding author. E-mail: xujin10@gmail.com