

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第6359642号  
(P6359642)

(45) 発行日 平成30年7月18日 (2018. 7. 18)

(24) 登録日 平成30年6月29日 (2018. 6. 29)

(51) Int. Cl.		F I	
<b>GO 1 N</b>	<b>24/00</b>	<b>(2006. 01)</b>	GO 1 N 24/00 5 7 O G
<b>GO 1 N</b>	<b>24/12</b>	<b>(2006. 01)</b>	GO 1 N 24/12 5 1 O Z
<b>A 6 1 B</b>	<b>5/055</b>	<b>(2006. 01)</b>	A 6 1 B 5/055 3 8 2

請求項の数 15 (全 32 頁)

(21) 出願番号	特願2016-510905 (P2016-510905)	(73) 特許権者	515303023
(86) (22) 出願日	平成26年1月31日 (2014. 1. 31)		クオンタム ヴァリー インベストメント
(65) 公表番号	特表2016-522894 (P2016-522894A)		ファンド リミテッド パートナーシ
(43) 公表日	平成28年8月4日 (2016. 8. 4)		プ
(86) 国際出願番号	PCT/CA2014/000069		カナダ オンタリオ エヌ2アイ Oエイ
(87) 国際公開番号	W02014/176664		9 ウォータールー ウェストマウント
(87) 国際公開日	平成26年11月6日 (2014. 11. 6)		ロード ノース 5 6 0
審査請求日	平成28年12月16日 (2016. 12. 16)	(74) 代理人	100086771
(31) 優先権主張番号	61/819, 103		弁理士 西島 孝喜
(32) 優先日	平成25年5月3日 (2013. 5. 3)	(74) 代理人	100088694
(33) 優先権主張国	米国 (US)		弁理士 弟子丸 健
		(74) 代理人	100094569
			弁理士 田中 伸一郎
		(74) 代理人	100067013
			弁理士 大塚 文昭

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 効率的スピン偏極

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

スピン集団を制御する方法であって、  
 静磁場を含む試料環境内で空洞をスピン集団と結合する段階と、  
 前記試料環境内で前記スピン集団に影響を及ぼす優勢な熱偏極過程よりも高速に該スピン集団の偏極を増大する相互作用を前記空洞と該スピン集団の間に発生させる段階と、  
を含み、  
前記相互作用を発生させる段階は、静磁場に直交するように向けられた駆動場であって、前記スピン集団のスピン状態を前記空洞の空洞モードと結合するようになった駆動場を、前記スピン集団に印加する段階を含み、  
前記駆動場は、前記スピン集団のスピン共鳴周波数 (  $\omega_s$  ) に同調され、前記空洞モードは、空洞共鳴周波数 (  $\omega_c$  ) に対応し、該空洞共鳴周波数 (  $\omega_c$  ) は、量  $\omega_c = \omega_s - \delta$  だけ該スピン共鳴周波数 (  $\omega_s$  ) から離調されることを特徴とする方法。

【請求項 2】

前記スピン集団は、複数の角運動量部分空間を含む状態空間を定め、  
前記方法は、  
前記スピン状態と前記空洞モードとの間の前記結合を、前記複数の角運動量部分空間のそれぞれに対して独立して作用させ、前記複数の角運動量部分空間を互いに混合する、反復的な過程を実行することにより、前記スピン集団の偏極を増大する段階を含むことを特徴とする請求項 1 に記載の方法。

## 【請求項 3】

前記複数の角運動量部分空間は、双極子相互作用、横断 ( $T_2$ ) 緩和過程、又は勾配場の印加のうちの少なくとも1つによって混合されることを特徴とする請求項 2 に記載の方法。

## 【請求項 4】

前記空洞に熱結合された冷却システムの作動によって該空洞の温度を制御する段階を含むことを特徴とする請求項 1 に記載の方法。

## 【請求項 5】

前記空洞と前記スピン集団の間の前記相互作用は、該スピン集団を冷却することを特徴とする請求項 1 に記載の方法。

## 【請求項 6】

前記空洞と前記スピン集団の間の前記相互作用は、該スピン集団を加熱することを特徴とする請求項 1 に記載の方法。

## 【請求項 7】

前記優勢な熱偏極過程は、固有緩和時間  $T_1$  を有する熱緩和を含み、前記空洞と前記スピン集団の間の前記相互作用は、該空洞のパラメータに関連して該固有緩和時間  $T_1$  よりも高速である偏極速度で該スピン集団の偏極を増大することを特徴とする請求項 1 から請求項 6 のいずれか 1 項に記載の方法。

## 【請求項 8】

静磁場でスピン集団と相互作用するようになった空洞と、  
前記スピン集団に影響を及ぼす優勢な熱偏極過程よりも高速に該スピン集団の偏極を増大する相互作用を前記空洞と該スピン集団の間に発生させるようになった共鳴器と、  
を含み、  
前記相互作用を発生させる段階は、静磁場に直交するように向けられた駆動場であって、前記スピン集団のスピン状態を前記空洞の空洞モードと結合するようになった駆動場を、前記スピン集団に印加する段階を含み、  
前記駆動場は、前記スピン集団のスピン共鳴周波数 ( $\omega_s$ ) に同調され、前記空洞モードは、空洞共鳴周波数 ( $\omega_c$ ) に対応し、該空洞共鳴周波数 ( $\omega_c$ ) は、量  $\omega_c = \omega_s$  だけ該スピン共鳴周波数 ( $\omega_s$ ) から離調されることを特徴とする磁気共鳴システム。

## 【請求項 9】

コントローラと、空洞及び共鳴器システムとを含み、  
前記コントローラは、請求項 1 から請求項 7 のいずれか 1 項に記載の方法を実行するために前記空洞及び共鳴器システムを制御するように構成されたことを特徴とする請求項 8 に記載のシステム。

## 【請求項 10】

前記共鳴器と前記空洞は、別個の構造体であることを特徴とする請求項 8 に記載のシステム。

## 【請求項 11】

前記共鳴器と前記空洞とを含む統合マルチモード共鳴器構造体を含むことを特徴とする請求項 8 に記載のシステム。

## 【請求項 12】

前記静磁場を発生させるようになった主磁石システムと、  
前記スピン集団を含む試料と、  
を更に含むことを特徴とする請求項 8 に記載のシステム。

## 【請求項 13】

前記空洞に熱結合され、かつ該空洞を冷却するようになった冷却システムを更に含むことを特徴とする請求項 8 に記載のシステム。

## 【請求項 14】

前記冷却システムは、液体窒素クライオスタット、液体ヘリウムクライオスタット、閉ループ冷凍機、ポンプド - ヘリウムクライオスタット、ヘリウム 3 冷凍機、又は希釈冷凍

10

20

30

40

50

機の中の少なくとも1つを含むことを特徴とする請求項13に記載のシステム。

【請求項15】

前記冷却システムは、前記スピン集団を含む試料に熱結合され、該冷却システムは、該試料を冷却するようになっていることを特徴とする請求項13に記載のシステム

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

〔優先権の主張〕

本出願は、2013年5月3日出願の米国特許仮出願出願番号第61/819,103号に対する優先権を主張するものであり、この文献の全内容がこれにより引用によって組み込まれる。

10

【0002】

本文献は、空洞を使用して磁気共鳴用途におけるスピン偏極を増大することに関する。

【背景技術】

【0003】

磁気共鳴システムにおいて、信号対ノイズ比(SNR)は、一般的に、スピン偏極と、環境との熱平衡に達するのに必要とされる時間とに依存する。エネルギー緩和時間 $T_1$ によって特徴付けられる熱平衡に達するのに必要とされる時間は、多くの場合に、例えば低温では長くなる。量子系からエントロピーを除去するための従来技術は、取りわけ、動的核偏極(DNP)、アルゴリズム冷却、光ポンピング、レーザー冷却、及びマイクロ波冷却を含む。

20

【0004】

様々な手法が、磁気共鳴用途において信号対ノイズ比(SNR)を高めるために使用されている。例えば、複数回の取得にわたる信号平均化は、SNRを高めるために多くの場合に使用される。別の手法は、例えば、複数の誘導コイルを重ねてフェーズドアレイ技術を使用することにより、誘導プローブ感度を高めることである。一部のシステムでは、誘導プローブは、誘導プローブ内の固有ノイズを低減するために寒剤に埋め込まれる。

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

【0005】

30

一部の態様において、空洞がスピン集団と結合され、共鳴器が、空洞とスピン集団の間の相互作用をもたらす駆動場を発生させる。一部の場合に、この相互作用は、熱( $T_1$ )緩和過程又はスピン集団に影響を及ぼすあらゆる他の熱偏極過程よりも高速にスピン集団の偏極を増大する。

【0006】

一部の実施では、空洞は、スピン集団のスピン共鳴周波数から離調され、駆動場に関連付けられたラビ周波数が、空洞離調に適合される。一部の場合に、スピン集団の偏極は、例えば、スピン集団の各角運動量部分空間に対して独立に作用する空洞ベースの冷却と角運動量部分空間を混合する混合過程とによって反復的に増大される。

【0007】

40

一部の実施では、空洞ベースの冷却は、オン・デマンドで利用可能にされ、かつ熱偏極よりも高速なものを与えることができる。スピン集団の偏極の増大は、改善されたSNR又は一部の場合に他の利点をもたらすことができる。

【0008】

1つ又はそれよりも多くの実施の詳細を添付図面及び下記の説明に示している。他の特徴、目的、及び利点は、これらの説明及び図面、並びに特許請求の範囲から明らかであろう。

【0009】

様々な図面内の類似の参照符号は類似の要素を示している。

【図面の簡単な説明】

50

## 【0010】

【図1A】例示的磁気共鳴システムの概略図である。

【図1B】例示的制御システムの概略図である。

【図1C】スピン集団の偏極を増大するための例示的技術の流れ図である。

【図2】例示的磁気共鳴システムにおけるスピン共鳴周波数、空洞共鳴周波数、及びラビ周波数を示すプロット図である。

【図3】2レベル空洞に結合されたスピンに関する2つの例示的エネルギーレベル図である。

【図4】例示的空洞冷却スピン集団のディッケ部分空間に関する  $\langle J_x(t) \rangle / J$  の正規化予想値の疑似推移を示すプロット図である。

【図5】2レベル空洞に結合された例示的スピン系のエネルギーレベル図である。

【図6】例示的3スピンヒルベルト空間の図である。

【図7】例示的スピン集団に対して計算した有効冷却時間を示すプロット図である。

【図8A】例示的空洞ベース冷却過程におけるエントロピー流れを示す概略図である。

【図8B】図8Aに示す速度  $s_C$  及び  $c_F$  の例示的値を示すプロット図である。

【発明を実施するための形態】

## 【0011】

ここで、例えば、スピン集団を急速に偏極することによって磁気共鳴システム内の信号対ノイズ比(SNR)を高めるために使用することができる技術を説明する。説明する技術は、核磁気共鳴(NMR)分光測定、電子スピン共鳴(ESR)分光測定、核四重極共鳴(NQR)分光測定、核磁気共鳴撮像(MRI)、量子的技術及びデバイス、並びに他の用途を含む様々な状況でこれら及び他の利点を達成するために使用することができる。

## 【0012】

磁気共鳴環境において集団スピン系に適用される空洞ベースの冷却技術を説明する。一部の実施では、集団スピン系の全ての結合角運動量部分空間をこの空洞のものに等しい純度を有する状態に空洞パラメータに関する時間尺度で能動的に駆動するために、低いモード体積及び高い品質係数を有する空洞が使用される。一部の事例では、空洞ベース冷却を角運動量部分空間の混合と交替させることにより、スピン集団は、スピンの特徴的熱緩和時間よりも有意に短いとすることができる時間尺度で空洞の純度に近づくことになる。一部の場合に、空洞ベースの冷却過程の時間にわたるスピン集団の偏極の増強は、熱緩和速度( $1/T_1$ )よりも高速な有効偏極速度( $1/T_{1,eff}$ )を用いて、熱スピン格子緩和過程と同じくモデル化することができる。

## 【0013】

従って、スピン集団から熱を除去する(スピン温度を低下させる)ために、又はスピン集団に熱を追加する(スピン温度を上昇させる)ためにこの空洞を使用することができ、それによってスピン偏極が増大される。スピン集団を加熱することにより、負のスピン温度に対応することができる逆偏極を生成することができる。

## 【0014】

図1Aは、例示的磁気共鳴システム100の概略図である。図1Aに示す例示的磁気共鳴システム100は、主磁石システム102と、冷却システム120と、共鳴器及び空洞システム112と、スピン108を閉じ込める試料110と、制御システム118とを含む。磁気共鳴システムは、追加の又は異なる特徴を含むことができ、磁気共鳴システムの構成要素は、図1Aに示すように又は別の方式で配置することができる。

## 【0015】

例示的な共鳴器及び空洞システム112は、以下により詳細に説明するように、スピン集団を制御するために使用することができる。一部の場合に、空洞及び共鳴器システム112は、スピン集団を加熱又は冷却することによってスピン集団の偏極を増大する。

## 【0016】

冷却システム120は、共鳴器及び空洞システム112のための熱環境を与える。一部の場合に、冷却システム120は、空洞の低温を維持するために空洞から熱を吸収するこ

10

20

30

40

50

とができる。冷却システム 120 は、共鳴器及び空洞システム 112、試料 110、又はこれらの両方との熱接触状態で存在することができる。一部の場合に、冷却システム 120 は、共鳴器及び空洞システム 112、試料 110、又はこれらの両方を液体ヘリウム温度（例えば、約 4 ケルビン）、液体窒素温度（例えば、約 77 ケルビン）、又は別の低温（例えば、100 よりも低いケルビン）に維持する。一部の場合に、冷却システム 120 は、共鳴器及び空洞システム 112、試料 110、又はこれらの両方をパルス管冷凍機温度（例えば、5 ~ 11 ケルビン）、ポンプドヘリウムクライオスタット温度（例えば、1.5 ケルビン）、ヘリウム 3 冷凍機温度（例えば、300 ミリケルビン）、希釈冷凍機温度（例えば、15 ミリケルビン）、又は別の温度に維持する。

#### 【0017】

一部の場合に、共鳴器と空洞は、2つの別個の構造として実施され、これらの両方が、同じ低温に保持される。一部の場合に、共鳴器と空洞は、2つの別個の構造として実施され、空洞は低温に保持され、一方、共鳴器はより高い温度に保持される。一部の場合に、共鳴器/空洞統合システムが、低温に保持される。一般的に様々な冷却システムを使用することができ、冷却システム 120 の特徴を望ましい作動温度  $T_c$ 、共鳴器及び空洞システム 112 のパラメータ、又は磁気共鳴システム 100 の他の態様に対して適応させることができる。

#### 【0018】

一部の実施では、共鳴器及び空洞システム 112 は、室温（約 300 K）から液体ヘリウム温度（約 4 K）の範囲にある望ましい作動温度  $T_c$  で作動し、冷却システム 120 は、望ましい作動温度  $T_c$  を維持するために液流クライオスタットを使用する。冷却システム 120 は、中空クライオスタットを含むことができ、共鳴器及び空洞システム 112 は、クライオスタットの内側にある低温板上に装着することができる。共鳴器及び空洞システム 112 は、クライオスタットとの熱接触状態で装着することができ、熱輻射シールドで取り囲むことができる。冷却システム 120 は、液体寒剤を低温ヘッドに連続的に移送することができる移送管によって液体寒剤供給源（例えば、液体窒素デュワー又は液体ヘリウムデュワー）に接続することができる。流量及び使用する液体寒剤は、作動温度を制御することができる。通気孔を通してガスを排気することができる。

#### 【0019】

一部の場合に、冷却システム 120 は、共鳴器及び空洞システム 112 の望ましい作動温度  $T_c$  を維持するために閉ループシステム（例えば、市販の Gifford-McMahon パルス管低温冷却器）を使用する。閉ループシステム又はパルス管システムは、一部の事例では、高価な液体寒剤を連続的に移送する必要性を回避することができる。一部の閉ループ冷凍機では、クライオスタットは2つの段を有し、第1の段（例えば、40 K から 80 K の範囲にわたる）は、第2の段に対する熱絶縁体として機能し、第2の段は、低温ヘッドと共鳴器及び空洞システム 112 とを包み込む。一部の例示的な閉ループシステムは、10 ケルビンの安定した作動温度に達することができる。

#### 【0020】

一部の場合に、冷却システム 120 は、共鳴器及び空洞システム 112 の望ましい作動温度  $T_c$  を維持するために液体ヘリウムクライオスタットを使用する。液体ヘリウムクライオスタットはそれ程複雑ではなく、一部の用途ではより安定したものとすることができる。液体ヘリウムクライオスタットが使用される場合に、共鳴器及び空洞システム 112 は、液体ヘリウム中に浸漬する（例えば、完全又は部分的に浸漬する）ことができる。システムは、液体窒素を含む外側デュワーと、液体ヘリウムを含む内側デュワーとを含むことができ、これらの2つのデュワーは、真空ジャケット又は別の熱絶縁体によって分離することができる。一般的に液体ヘリウムクライオスタットシステムは、約 4 ケルビンの安定した作動温度に達することができる。

#### 【0021】

一部の場合に、冷却システム 120 は、共鳴器及び空洞システム 112 の望ましい作動温度  $T_c$  を維持するためにヘリウム - ガス - 流れ（又はポンプドヘリウム）クライオスタ

10

20

30

40

50

ットを使用する。一部の市販ヘリウム - ガス - 流れ (又はポンプドヘリウム) クライオスタットは、1.5ケルビンの安定した作動温度に達することができる。そのような場合に、共鳴器及び空洞システム112は、クライオスタットの内側に装着することができ、ヘリウム - ガス - 流れを共鳴器及び空洞システム112の面にわたって連通させることができる。一部の実施では、冷却システム120は、共鳴器及び空洞システム112を取り囲む真空ジャケットによって熱絶縁された液体ヘリウムデューワーを含み、弁 (例えば、液体ヘリウムデューワー内で機械的に制御されるニードル弁) は、デューワーからのヘリウム流を制御することができる。弁は、ガス加熱器内に開くポートを液体ヘリウムが蒸発して共鳴器及び空洞システム112に流れるように制御することができる。弁及び加熱器は、望ましい温度調整を与えるように外部から制御することができる。

10

#### 【0022】

一部の例示的なヘリウム - ガス - 流れクライオスタットは、その中のヘリウムガスの蒸気圧を下げることによって1ケルビンの作動温度に達することができる。この作動温度への到達は、容器の内側の小型入れ物 (「1-Kポット」として公知) 内のヘリウムに対してポンピングを行って蒸気圧を下げ、それによって液体ヘリウムの沸点を下げる (例えば、4.2ケルビンから1ケルビンに) ことによって達成することができる。一部のシステムは、更に冷却することができ、例えば、ヘリウム3同位体 (一般的にヘリウム4同位体よりも高価である) を用いてミリケルビン温度に達することができる。ヘリウム3は、かなり低い蒸気圧までポンピングすることができ、それによって沸点は200ミリケルビン程度の低さまで下がる。漏出を回避し、ヘリウム3材料を保存するために閉ループシステムを使用することができる。

20

#### 【0023】

一部の場合に、冷却システム120は、共鳴器及び空洞システム112の望ましい作動温度 $T_c$ を維持するために希釈冷凍機システムを使用する。一般的に希釈冷凍機システムは、上述のヘリウム - ガス - 流れクライオスタットと類似のヘリウム3循環システムを使用する。希釈冷凍機システムは、1-Kポットに入る前にヘリウム3を予備冷却することができ、それによって2ミリケルビン程度の低さの作動温度が得られる。

#### 【0024】

図1Aに示す磁気共鳴システム100は、試料110中のスピン集団を偏極することができる。例えば、磁気共鳴システム100は、スピン集団を熱平衡状態又は別の状態 (すなわち、熱平衡状態以外の熱平衡状態よりも強く又は弱く偏極されたものとする) にスピン集団を冷却又はマッピングすることができる。

30

#### 【0025】

図示の例では、試料110中のスピン108は、主磁石システム102、並びに共鳴器及び空洞システム112と個々に相互作用する。主磁石システム102は、スピン状態を量子化し、スピン集団のラーモア周波数を設定する。例えば、共鳴器が発生させる無線周波数磁場により、スピン磁化の回転をもたらすことができる。スピンは環境に弱く結合するが、空洞は環境 (例えば、冷却システム120) に十分に結合し、従って、空洞が熱平衡に達するのに要する時間は、スピンが熱平衡に達するのに要する時間よりもかなり短い。共鳴器は、スピン集団が空洞に結合し、スピン系のディッケ状態及び他の角運動量部分空間が空洞との熱平衡に達するようにラビ振動を駆動することができる。

40

#### 【0026】

共鳴器及び空洞システム112は、空洞共鳴及びスピン共鳴の観点から説明することができる。スピン共鳴は、空洞共鳴からラビ周波数だけシフトしたものである。ラビ周波数 (すなわち、ラビ振動の周波数) は、スピン共鳴周波数で印加される駆動場の強さの関数とすることができる。ラビ周波数は、スピンを空洞モードに結合するように設定することができる。例えば、駆動場の強さは、ラビ周波数が空洞共鳴とスピン共鳴の間の差に実質的に等しいように設定することができる。一部の場合に、システムは、*Tavis-Cammings* ハミルトン関数を通して空洞モードに結合されたスピン集団のディッケ状態と角運動量部分空間とのセット (すなわち、ディッケ部分空間及び角運動量部分空間にお

50

ける状態)としてモデル化することができる。

【0027】

低いモード体積及び高い品質係数を有する空洞は、スピン集団に対して強いスピン空洞結合をもたらすことができる。一部の事例では、ディック状態と空洞の間の光子交換速度は、

$$\sqrt{N_s}$$

( $N_s$ は、スピン集団内のスピンの数)及び $g$ (単一スピンに関するスピン空洞結合強度)としてスケールされる。一部の例では、スピン空洞結合強度は、モード体積の平方根に反比例し、アドミタンス(すなわち、空洞の品質係数)の平方根に正比例する。

10

【0028】

一部の実施では、空洞は効率的かつ急速に冷却され、空洞の熱容量は、スピンの熱容量と比較して大きい。一部の事例では、スピン空洞相互作用によってもたらされる偏極速度は、熱 $T_1$ 緩和過程よりも有意に高速なものとすることができる。一部の場合に、スピン空洞相互作用によってもたらされる偏極速度は、自然放出、誘導放出、熱 $T_1$ 緩和、又はその他を含むスピン集団に影響を及ぼすいずれかの内部緩和過程よりも高速である。例えば、低モード体積及び高品質係数の空洞、効率的空洞冷却、効率的スピン空洞結合、角運動量部分空間の混合、又はこれら及び他の特徴の組合せの結果として、スピン集団を基底状態に向けて急速に冷却することができる。角運動量部分空間の混合は、例えば、空洞冷却過程を繰り返し、双極子結合、自然 $T_2$ 緩和、外部勾配場のような相互作用を用いて達成することができる。一部の態様において、この混合は、 $T_1$ 緩和過程の実質的な「短絡」を与えることができる。例えば、一部の事例においてより高速なスピン偏極を達成するために、図1Cに示す技術を使用することができる。

20

【0029】

図1Cは、スピン集団の偏極を増大するための例示的過程195を示す流れ図である。例示的過程195は、例えば、図1Aに示す例示的磁気共鳴システム100又は別のタイプのシステムにおいて実施することができる。図1Cに示す例示的過程195は、追加の又は異なる作動を含むことができる。一部の場合に、個々の作動を複数の部分作動に分割することができ、又は作動のうち2つ又はそれよりも多くを単一作動として組み合わせるか、又は同時に実施することができる。更に、作動の一部又は全ては、例えば望ましい状態又は偏極が得られるまで、又は終了条件に達するまで反復するか又は繰り返すことができる。

30

【0030】

図1Cに示すように、196において、スピン集団の角運動量部分空間は、低エネルギー状態にマッピングされる。例えば、1つ又はそれよりも多くの角運動量部分空間をそれぞれの最も低い状態まで冷却することができる。一部の場合に、空洞とスピン集団間のコヒーレント相互作用は、各角運動量部分空間をその最低エネルギー状態に駆動することができる。マッピングは、例えば、駆動場をスピン集団に印加することによって発生させることができる。197において、角運動量部分空間が接続される。角運動量部分空間を接続するのに、一部の異なる技術のうち1つ又はそれよりも多くを使用することができる。一部の事例では、角運動量部分空間は、全体の空間の様々な部分空間を混合する過程によって接続される。例えば、角運動量部分空間を接続するのに、スピン間双極子相互作用、横断( $T_2$ )緩和、外部勾配場、類似の外部又は内部の脱位相相互作用、又はこれらうちの1つ又はそれよりも多くの組合せを使用することができる。198において、より高い偏極状態が得られる。すなわち、スピン集団の状態は、スピン集団の角運動量部分空間がそれぞれの最低状態まで冷却され(196において)、かつ接続される(197において)前よりも強く偏極することができる。作動(196、197)は、例えば、望ましい偏極又は他の条件に達するまで1回又はそれよりも多く反復することができる。

40

【0031】

50

一部の実施では、スピン集団の初期状態（196の前の）は、スピン集団の熱平衡状態よりも弱い偏極を有する。例えば、スピン集団の初期状態は、殆ど又は全く偏極を持たない高混合状態とすることができる。各反復回に対して生成される状態の偏極は、初期状態の偏極よりも強いとすることができる。一部の事例では、偏極は、各反復回において連続して増大される。例えば、作動（196、197）は、スピン集団が、熱平衡偏極又は他の指定された偏極レベル（例えば、スピン集団に印加される磁気共鳴シーケンスに対する入力偏極）に達するまで繰り返すことができる。

#### 【0032】

一部の実施では、オン・デマンドでスピン集団を偏極するために、過程195を使用することができる。例えば、過程195は、試料が磁気共鳴システムに配置されている間に  
10  
いずれかの時点で開始することができる。一部の場合に、スピン集団は、撮像走査と走査の間、又は信号取得と取得の間に偏極される。一般的に、スピン集団は、過程195が開始される時にいずれかの状態（例えば、いずれかの完全混合状態又は部分混合状態）にある可能性がある。一部の場合に、過程195は、オン・デマンドで指定された時点、例えば、パルスシーケンス過程、分光測定過程、又は撮像過程、又は別の過程において、指定された量の時間にわたってラビ場を印加することによって開始される。

#### 【0033】

図1Aに示す例では、スピン集団は、磁気共鳴システム100の印加磁場と磁氣的に相互作用する非ゼロスピンを有するいずれかの粒子集合とすることができる。例えば、スピン集団は、原子核スピン、電子スピン、又は原子核スピンと電子スピンの組合せを含む  
20  
ことができる。原子核スピンの例は、水素原子核（ $^1\text{H}$ ）、炭素13原子核（ $^{13}\text{C}$ ）、及びその他を含む。一部の実施では、スピン集団は、同一のスピン1/2粒子の集合である。

#### 【0034】

例示的主磁石システム102は、図1Aにラベル付けして本明細書では $B_0$ 場104と記す均一な静磁場を発生させる。図1Aに示す例示的主磁石システム102は、超電導ソレノイド、電磁石、永久磁石、又は静磁場を発生させる別のタイプの磁石として実施することができる。図1Aでは、例示的 $B_0$ 場104は、試料110の体積域にわたって均一であり、軸対称基準系106のz方向（本明細書では「軸線方向」とも記す）に沿って向けられる。  
30

#### 【0035】

図1Aに示す例示的システムでは、スピン108と主磁石システム102の間の相互作用は、Zeemanハミルトン関数 $H = -\mu \cdot B$ を含み、式中の $\mu$ はスピンの磁気モーメントを表し、 $B$ は磁場を表している。スピン1/2粒子には、スピンの $B_0$ 場104に位置合わせする状態、及びスピンの $B_0$ 場104と逆位置合わせする状態という2つの状態が存在する。 $B_0$ 場104の向きがz軸に沿って定められる場合に、Zeemanハミルトン関数を $H = -\mu_z B_0$ と書くことができる。量子力学的には $\mu_z = \gamma \hbar m$ であり、式中の  
40  
はスピン磁気回転比であり、 $m$ は、角運動量固有状態 $|m\rangle_s$ 及び固有値

$$m = \pm 1/2$$

を有するz方向スピン角運動量演算子であり、

$\hbar$

はプランクの定数である。係数 $\gamma_s = \mu_z / \hbar$ は、ラーモア周波数としても公知のスピン共鳴周波数である。

#### 【0036】

図1Aに示す例では、 $B_0$ 場104に位置合わせ又は逆位置合わせのいずれかの状態にある集団の個々の構成要素の熱分布は、マクスウェル-ボルツマン統計によって決定され、熱平衡状態に対する密度行列は、次式によって与えられる。

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-H/kT},$$

式中の分母  $Z$  は分配関数であり、 $H$  は、スピン集団のハミルトン関数である。分配関数は、 $Z = \sum e^{-H/kT}$  で表すことができ、式中の和は、全ての可能なスピン集団構成にわたるものである。定数  $k$  はボルツマン係数であり、 $T$  は周辺部温度である。従って、スピン集団の熱平衡状態（及びそれに関連付けられた熱平衡偏極）は、試料環境（磁場強度及び試料温度を含む）によって上式に従って少なくとも部分的に決定することができる。スピン

10

$$\langle M_z \rangle = (\gamma \hbar) \text{Tr} \{ J_z \rho \}$$

式中の

$$J_z \equiv \sum_{j=1}^{N_s} \sigma_z^{(j)} / 2$$

は、合計スピン集団  $z$  角運動量であり、 $N_s$  は集団スピンサイズである。

【 0 0 3 7 】

20

スピン集団がその環境と熱平衡化されると、熱平衡から離れるずれをもたらしずれかの励起は、必然的に熱平衡化するのに時間（熱緩和速度  $T_1$  によって特徴付けられる）を要することになる。熱緩和過程は、非熱状態から熱平衡状態に向けて  $1 / T_1$  に比例する指数関数的速度でスピン集団を推移させる。多くの磁気共鳴用途は、スピンを操作してこれらのスピンの発生させる誘導信号を取得する。信号対ノイズ比（SNR）を改善するために、通例的には信号平均化が使用される。しかし、緩和時間  $T_1$  は比較的長く、それによって信号平均化の効率は低下する。図 1 A に示す例では、緩和過程を実質的に「短絡」するために共鳴器及び空洞システム 1 1 2 を使用することができ（例えば、図 1 C に示す例示的過程 1 9 5 で、又は別の方式で）、それによってこの待機時間が有意に短縮され、信号平均化の効率が高まる。

30

【 0 0 3 8 】

一部の事例では、共鳴器及び空洞システム 1 1 2 は、スピン集団を制御する共鳴器構成要素と、スピン集団を冷却する空洞構成要素とを含むことができる。共鳴器と空洞とは、別個の構造として実施することができ、又は共鳴器 / 空洞統合システムを使用することができる。一部の実施では、共鳴器は、試料 1 1 0 中のスピン 1 0 8 のうちの 1 つ又はそれよりも多くの共鳴周波数に同調される。例えば、共鳴器は、無線周波共鳴器、マイクロ波共鳴器、又は別のタイプの共鳴器とすることができる。

【 0 0 3 9 】

共鳴器及び空洞システム 1 1 2 は、マルチモード共鳴システムの例である。一部の例では、マルチモード共鳴システムは、1 つ又はそれよりも多くの駆動周波数と、1 つ又はそれよりも多くの空洞モードとを有し、時に他の共鳴周波数又はモードを有する。駆動周波数は、 $B_0$  場 1 0 4 の強度と、スピン 1 0 8 の磁気回転比とによって決定されるスピンの共鳴周波数に同調することができ、空洞モードは、駆動周波数からシフトさせることができる。一部のマルチモード共鳴システムでは、駆動周波数と空洞モードとが単一統合構造によって与えられる。統合マルチモード共鳴器構造の例は、二重ループ共鳴器、鳥かご共鳴器、及び他のタイプの構造を含む。一部のマルチモード共鳴システムでは、駆動周波数と空洞モードとが別個の構造によって与えられる。一部の場合に、コイル及び空洞がスピン系には結合されるが、互いには結合しないように、低品質係数（低  $Q$ ）コイルの幾何学形状を高  $Q$  空洞と統合することができる。本明細書に説明する技術は、コイルに印加される単一駆動周波数又は時に複数の駆動周波数を用いて作動させることができる。

40

50

## 【 0 0 4 0 】

図 1 A に示す例では、空洞は、共鳴器の共鳴周波数とは異なる共鳴周波数  $\omega_c$  を有する。例示的共鳴器及び空洞システム 1 1 2 の空洞は、空洞の物理特性によって決定されるモードを有する電磁波に対応する。一般的に、空洞共鳴として基本モードが使用され、空洞の品質係数 ( Q ) を散逸エネルギーに対する空洞モード内の累積エネルギーの比として定めることができる。周波数の単位を用いて、空洞の品質係数を次式で表すことができる。

$$Q = \frac{\omega_c}{\Delta\omega}$$

式中の  $\omega_c$  は、空洞共鳴周波数であり、 $\Delta\omega$  は、空洞共鳴の - 3 d B のバンド幅である。空洞共鳴が、ローレンツ関数である分布によって与えられる場合に、バンド幅は、空洞周波数応答の半値全幅 ( F W H M ) によって与えられる。

10

## 【 0 0 4 1 】

一部の実施では、例示的共鳴器及び空洞システム 1 1 2 の空洞は、高い品質係数を有し ( 高 Q 空洞 ) 、従って、空洞内の電磁場は、散逸する前に多数回反射されることになる。同等に、空洞内の光子は、 $\omega_c$  が波の周波数である時に空洞散逸速度  $\Gamma = ( \omega_c / Q )$  によって特徴付けられる長い寿命を有する。そのような空洞は、値が高い品質係数を達成するために、超電導材料で製造して低温に保つことができる。例えば、高 Q 空洞の品質係数は、 $10^3 \sim 10^6$  の範囲又はそれよりも多い桁数を有することができる。これらの条件下では、空洞内の電磁場を量子力学的に量子調波振動子と同等であるものとして説明することができ、これは、空洞量子電磁力学又は空洞 Q E D として公知の標準的な取り扱いである。空洞内の電磁場のこの取り扱いは、スピン自由度だけが量子力学的であり、それに対して磁場が依然として古典的である Z e e m a n 相互作用と対照的である。

20

## 【 0 0 4 2 】

例示目的で、本明細書では、空洞モードの量子力学的説明を提供する。電磁場はマクスウェルの方程式を満たし、電場 E と磁場 B の両方をベクトルポテンシャル A を用いて次式のように説明することができる。

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A},$$

30

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}.$$

ベクトルポテンシャル自体は、以下の波動方程式を満たす。

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2},$$

式中の c は光速である。波動方程式は、次式の平面波のフーリエ数列の形式の形式解を有する。

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}),$$

40

式中の各フーリエ成分  $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t)$  も波動方程式を満たす。これらの平面波は、空洞 Q E D の場合に空洞に対応するものであり、 $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t)$  が

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) = \mathbf{A}_{\mathbf{k}} e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}$$

の形式の時間依存性を有すると仮定すると、電場及び磁場は次式によって与えられる。

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}} = i\omega_{\mathbf{k}} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}}t - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}),$$

50

$$B_k = ik \times (A_k e^{-i\omega_k t + ikr} - A_k^* e^{i\omega_k t - ikr})$$

式中の時間周波数及び空間周波数（それぞれ  $\omega_k$  及び  $k$ ）は、 $\omega_k = c k$  によって関連付けられる。

【 0 0 4 3 】

従って、単一モード  $k$  のエネルギーは次式によって与えられる。

$$W_k = \frac{1}{2} \int dV (\epsilon_0 E_k^2 + \mu_0^{-1} B_k^2) = 2\epsilon_0 V \omega_k^2 A_k \cdot A_k^*$$

式中の

$\epsilon_0$

及び  $\mu_0$  は、それぞれ、

$$c^2 \mu_0 \epsilon_0 = 1$$

であるような自由空間の誘電率及び透磁率であり、 $V$  は、放射線場を含む空間又は空洞の体積である。実数部  $P$  及び虚数部  $Q$  を用いてベクトル係数を定めることにより、 $A_k$  は次式として表される。

$$A_k = (4\epsilon_0 V \omega_k^2)^{-\frac{1}{2}} (\omega_k Q_k + i P_k) \epsilon_k$$

式中の

$\epsilon_k$

は、電磁波に対する偏極ベクトルである。 $Q_k$  及び  $P_k$  を使用すると、エネルギーは次式によって与えられる。

$$W_k = \frac{1}{2} (P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2)$$

この式は、単純な調波振動子のエネルギーに関する形式にある。従って、電磁波のベクトル  $Q_k$  及び  $P_k$  を調波振動子の位置ベクトル及び運動量ベクトルとして処理することができる。それによって単一量子（光子）に関する電磁場を調波振動子の標準的な正準量子化によって量子化することが可能になる。

【 0 0 4 4 】

次いで、空洞内の単一電磁モードの量子論的取り扱いを考察する。量子調波振動子に関するハミルトン関数は、正準  $P$  変数及び正準  $Q$  変数を用いて次式のように書くことができる。

$$H = \frac{1}{2} (P^2 + \omega^2 Q^2).$$

次いで、それぞれ消滅演算子及び生成演算子と呼ぶ演算子  $a$  及び  $a^+$  をベクトル  $P$  及び  $Q$  を用いて次式のように定めることができる。

$$a = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left( Q + \frac{i}{\omega} P \right),$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left( Q - \frac{i}{\omega} P \right).$$

これらの演算子は、交換関係  $[a, a^+] = 1$  を満たす。従って、このハミルトン関数を

10

20

30

40

50

生成演算子及び消滅演算子を用いて次式のように書くことができる。

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right).$$

2分の1という定数因数は、空洞モードの一定のエネルギーシフトに対応し、従って、この一定の量だけエネルギーを再調整する相互作用フレーム内に入ることによってこの因数を除去することができる。

【 0 0 4 5 】

このハミルトン関数のエネルギー固有状態は、空洞内の放射線の単一量子（光子）に対応するいわゆる数状態である。これらの数状態を  $|n\rangle_c$  とラベル付けし、 $n = [0, 1, 2, 3, \dots]$  である。数状態に対する生成演算子及び消滅演算子の作用は、次式のように空洞に光子を生成するか又はそこから光子を除去することである。

$$a|n\rangle_c = \sqrt{n}|n-1\rangle_c$$

$$a^\dagger|n\rangle_c = \sqrt{n+1}|n+1\rangle_c$$

従って、演算子  $N = a^\dagger a$ （数演算子）は、与えられた数状態に対する光子の合計数を次式として与える。

$$a^\dagger a|n\rangle_c = n|n\rangle_c.$$

光子数状態  $|n\rangle_c$  は、エネルギー

$$\left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

を有する次式のハミルトン関数のエネルギー固有状態である。

$$H|n\rangle_c = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle_c,$$

【 0 0 4 6 】

次いで、例示的共鳴器及び空洞システム 1 1 2 の空洞が、スピン 1 0 8 を含むスピン集団に如何にして結合するかを説明する。支配的な相互作用は、ここでもまた、空洞電磁場へのスピン磁気双極子結合である。従って、次式が与えられ、ここで空洞の電磁場が量子力学的に取り扱われる。

$$H_I = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B},$$

調波振動子演算子を用いて、空洞内の磁場を次式のように書くことができる。

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{\mu_0 \hbar \omega}{2V}} (a - a^\dagger) u(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\epsilon}$$

式中の

$\boldsymbol{\epsilon}$

は伝播方向であり、 $\mu_0$  は自由空間透磁率定数であり、

$\hbar$

はプランク定数であり、関数  $u(\mathbf{r}, t)$  は、空間的及び時間的な波の挙動を表している。一部の例では、

10

20

30

40

$$\epsilon = \hat{x}$$

とし、関数  $u(r, t)$  は、次式の形式を取る。

$$u(r, t) = u(r) \cos \omega t = u(y, z) \cos kx \cos \omega t,$$

式中の  $u(y, z)$  は、空洞磁場空間分布を表している。この形式では、モード体積を次式のように表すことができる。

$$V = \frac{\int |u(r)|^2 d^3 r}{\max[|u(r)|^2]}$$

10

従って、モード体積は、空洞磁場の空間的分布に関連し、一般的に空洞磁場内のより高い空間均一性は、より低いモード体積をもたらす。この場合に、スピン空洞相互作用ハミルトン関数は次式になる。

$$H_I = \frac{1}{2} g \hbar (a - a^\dagger) \sigma_x,$$

式中の定数  $g$  は、各スピンと空洞の間の結合強度を表し、 $\sigma_x$  は、 $x$  成分スピン角運動量演算子である。一部の事例では、結合強度を次の表現式によって定めることができる。

$$g \hbar = -\mu \cdot |\langle 0 | B | 1 \rangle| = \sqrt{\frac{\mu_0 \gamma^2 \hbar \omega}{2V}} |u(r)|$$

20

上述の例示的な式では、スピン空洞結合強度は、モード体積の平方根に反比例する。

【0047】

例示的共鳴器及び空洞システム112は、試料が  $B_0$  場104に存在する間にスピン集団に印加されるラビ場を発生させることができる共鳴器を含む。例えば、ラビ場は、連続場又はパルススピン・ロッキング場とすることができる。スピン系の内部ハミルトン関数との組合せで、ラビ場は、スピン集団のユニバーサル制御を与えることができる。一部の実施では、このようにしていずれかの磁気共鳴実験又はパルスシーケンスを実施することができる。共鳴器は、例えば、制御システム118からの信号に基づいてラビ場を発生させることができ、磁場のパラメータ（例えば、位相、強さ、周波数、継続時間等）を制御システム118からの信号によって少なくとも部分的に決定することができる。

30

【0048】

図2に示すプロット図200では、縦軸202が、共鳴器及び空洞の周波数応答を表し、横軸204が周波数範囲を表し、曲線206が、共鳴器及び空洞システム112の例示的实施に関する応答形状を示している。図示の例では、低い方の周波数応答（ $\omega_1$ とラベル付けしている）は共鳴器のものであり、高い方の周波数応答（ $\omega_2$ とラベル付けしている）は空洞のものである。空洞の品質係数（ $Q$ ）は、共鳴器の品質係数（ $Q$ ）よりも高く、共鳴周波数は、ラビ周波数（ $\omega_R$ とラベル付けしている）だけ異なる。

40

【0049】

例示的制御システム118は、図1Aに示す磁気共鳴システム100の共鳴器及び空洞システム112を制御することができる。一部の場合に、制御システム118は、更に磁気共鳴システム100の冷却システム120又は他の構成要素を制御することができる。制御システム118は、共鳴器及び空洞システム112に電気結合され、それと通信するようになっている。例えば、制御システム118は、共鳴器、空洞、又はこれらの両方を駆動する電圧信号又は電流信号を供給するように適応させることができ、更に共鳴器、空洞、又はこれらの両方から電圧信号又は電流信号を取得することができる。

【0050】

図1Bは、例示的制御システム150の概略図である。図1Bに示す例示的制御システ

50

ム 1 5 0 は、コントローラ 1 5 2 と、波形発生器 1 5 4 と、増幅器 1 5 6 と、送信機 / 受信機スイッチ 1 5 8 と、信号プロセッサ 1 6 2 とを含む。制御システムは、追加の特徴又は異なる特徴を含むことができ、制御システムの特徴は、図 1 B に示すように、又は別の方式で作動するように構成することができる。

【 0 0 5 1 】

図 1 B に示す例では、例示的制御システム 1 5 0 は、外部システム 1 9 0 と通信するようになっている。例えば、外部システム 1 9 0 は、共鳴器、空洞、又は磁気共鳴システムの別の構成要素とすることができる。制御システム 1 5 0 は、外部システム 1 9 0 又は別の外部供給源を含む 1 つ又はそれよりも多くの外部供給源によって供給される入力に基づいて作動させることができる。例えば、制御システムは、外部コンピュータ、操作者、又は別の供給源から入力を受け入ることができる。

10

【 0 0 5 2 】

図 1 B に示す例示的制御システム 1 5 0 は、複数の作動モードで作動させることができる。第 1 の例示的作動モードでは、コントローラ 1 5 2 は、望ましい制御作動 1 7 0 を波形発生器 1 5 4 に供給する。望ましい制御作動 1 7 0 に基づいて、波形発生器 1 5 4 は波形 1 7 2 を発生させる。一部の場合に、波形発生器 1 5 4 は、更にシステムモデルデータ 1 7 1 を受け入れ、波形 1 7 2 を発生させる上でシステムモデルデータ 1 7 1 を使用する。波形 1 7 2 は、増幅器 1 5 6 によって受け取られる。増幅器 1 5 6 は、波形 1 7 2 に基づいて送信信号 1 7 4 を発生させる。この作動モードでは、送信機 / 受信機スイッチ 1 5 8 は、送信信号 1 7 4 を外部システム 1 9 0 に出力するように構成される。

20

【 0 0 5 3 】

第 2 の例示的作動モードでは、送信機 / 受信機スイッチ 1 5 8 は、外部システム 1 9 0 から信号を取得するように構成される。制御システム 1 5 0 は、取得信号を増幅、処理、分析、記憶、又は表示することができる。図 1 B に示すように、送信機 / 受信機スイッチ 1 5 8 は、外部システム 1 9 0 から得られた信号に基づいて受信信号 1 7 6 を受信機 1 6 0 に供給する。受信機 1 6 0 は、受信信号 1 7 6 を調整して、調整された信号 1 7 8 を信号プロセッサ 1 6 2 に供給する。信号プロセッサ 1 6 2 は、調整された信号 1 7 8 を処理してデータ 1 8 0 を発生させる。データ 1 8 0 は、分析、表示、記憶、又は他の作業に向けてコントローラ 1 5 2 に供給される。

【 0 0 5 4 】

コントローラ 1 5 2 は、コンピュータ又はコンピュータシステム、デジタル電子コントローラ、マイクロプロセッサ、又は別のタイプのデータ処理装置とする（又は含む）ことができる。コントローラ 1 5 2 は、メモリ、プロセッサを含むことができ、汎用コンピュータとして作動させることができ、又は特定用途向けデバイスとして作動させることができる。

30

【 0 0 5 5 】

次いで、試料 1 1 0 中のスピン集団を空洞に結合し、コヒーレントラビ駆動の下で冷却することができる例示的過程を示している。大きい静磁場（図 1 A に  $B_0$  場 1 0 4 で表す）内で量子化され、共鳴器及び空洞システム 1 1 2 の高 Q 空洞に磁気結合される非相互作用スピン 1 / 2 粒子（図 1 A にスピン 1 0 8 で表す）の誘導駆動集団を端緒とする。共鳴器及び空洞システム 1 1 2 の共鳴器によって与えられる駆動の存在下で、スピンは、コヒーレント放射過程を通して空洞と相互作用し、スピン空洞系を空洞に結合された単一集合磁気双極子として量子力学的に処理することができる。量子光学と同様に、スピン空洞動特性を Tavis - Cammings (TC) ハミルトン関数が発生させるものとして説明する。制御場が、スピンのラーモア周波数で共鳴すると仮定すると、回転波近似 (RWA) の下でのスピン空洞ハミルトン関数は、 $H = H_0 + H_R(t) + H_1$  によって与えられ、この場合に、次式が成り立つ。

40

$$H_0 = \omega_c a^\dagger a + \omega_s J_z$$

50

$$H_R(t) = \Omega_R \cos(\omega_s t) J_x$$

$$H_I = g(a^\dagger J_- + a J_+)$$

ここでもまた、 $a^\dagger$  ( $a$ ) は、空洞を説明する生成 (消滅) 演算子であり、 $\Omega_R$  は、駆動場の強度 (ラビ周波数) であり、 $\omega_s$  は、空洞の共鳴周波数であり、 $\omega_s$  は、スピンのラーモア共鳴周波数であり、 $g$  は、

$$\hbar = 1.$$

10

を単位とする、集団内の単一スピンへの空洞の結合強度である。この場合に、次式が、 $N_s$  個のスピンから構成される集団に対する合計角運動量スピン演算子であるという表記法を用いた。

$$J_\alpha \equiv \sum_{j=1}^{N_s} \sigma_\alpha^{(j)} / 2$$

$N_s$  個の同一のスピンから構成されるスピン集団の状態空間  $V$  を結合された角運動量部分空間の直和として書くことができる。

$$V = \bigoplus_{J=j_0}^{\frac{N_s}{2}} V_J^{\oplus n_J}$$

20

上式において  $N_s$  が偶数 (奇数) である場合に、 $j_0 = 0$  ( $1/2$ ) である。 $V_J$  は、次元  $d_J = 2J + 1$  を有するスピン  $J$  粒子の状態空間であり、同じ合計スピン  $J$  を有する  $n_J$  個の縮退部分空間が存在する。TCハミルトン関数は、大域的  $SU(2)$  対称性を有するので、この表現形式では部分空間の間で結合を行わないことになる。この表現形式において最も大きい部分空間をディッケ部分空間と呼ぶこの部分空間は、スピン集団の全ての全対称状態から構成される。ディッケ部分空間は、合計角運動量  $J = N_s / 2$  を有する系に対応する。ディッケ部分空間に限定されたTCハミルトン関数はディッケモデルとして公知であり、量子光学に関して研究されている。

30

【0056】

$H_0$  の固有状態は、空洞に関する光子数状態と、 $J_z$  方向にある各合計スピン部分空間の集合的角運動量のスピン状態とのテンソル積  $|n\rangle_c |J, m_z\rangle_s$  である。この場合に、 $n = 0, 1, 2, \dots, m_z = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$  であり、 $J$  は、結合された角運動量部分空間  $V_J$  をインデックス化する。合同系の集合的励起数は、 $N_{ex} = a^\dagger a + (J_z + J)$  によって与えられる。相互作用項  $H_I$  は  $N_{ex}$  と可換であり、従って、系の合計励起数を保存する。この相互作用は、状態  $|n\rangle_c |J, m_z\rangle_s$  と状態  $|n+1\rangle_c |J, m_z-1\rangle_s$  及び  $|n\rangle_c |J, m_z+1\rangle_s$  との間でそれぞれ

$$\sqrt{(n+1)(J(J+1) - m_z(m_z-1))}$$

40

及び

$$\sqrt{n(J(J+1) - m_z(m_z+1))}$$

の速度での遷移を駆動することができる。

【0057】

$H_1 = \omega_s (a^\dagger a + J_z)$  によって定められる回転フレーム内に移った後に、スピン空洞ハミルトン関数は、次式に変換される。

$$\tilde{H}^{(1)} = e^{itH_1} H_{sc} e^{-itH_1} - H_1$$

$$\tilde{H}^{(1)} = \delta\omega a^\dagger a + \Omega_R J_x + g(a^\dagger J_- + a J_+)$$

式中の  $\delta\omega = \omega_c - \omega_s$  は、空洞共鳴周波数からの駆動の離調であり、ハミルトン関数内のいずれかの時間依存項を除去するために、標準の回転波近似 (RWA) が行われる。

【0058】

ここで  $H_2 = \delta\omega a^\dagger a + \Omega_R J_x / 2$  の相互作用フレーム内に移ると、ハミルトン関数は、次式に変換される。 10

$$\tilde{H}^{(2)}(t) = H_{0\Omega_R}(t) + H_{-\Omega_R}(t) + H_{+\Omega_R}(t)$$

$$H_{0\Omega_R}(t) = g(e^{-i\delta\omega t} a + e^{i\delta\omega t} a^\dagger) J_x$$

$$H_{-\Omega_R}(t) = \frac{ig}{2} \left( e^{-i(\delta\omega - \Omega_R)t} a J_+^{(x)} - e^{i(\delta\omega - \Omega_R)t} a^\dagger J_-^{(x)} \right)$$

20

$$H_{+\Omega_R}(t) = \frac{ig}{2} \left( e^{-i(\delta\omega + \Omega_R)t} a J_-^{(x)} - e^{i(\delta\omega + \Omega_R)t} a^\dagger J_+^{(x)} \right)$$

式中の  $J_\pm^{(x)} = J_y \pm i J_z$  は、 $x$  基底のスピン昇降演算子である。

【0059】

$\Omega_R > 0$  に関する磁気共鳴交差緩和実験におけるハートマンハーン適合と同様に、 $\delta\omega = \omega_c - \omega_s$  が  $\Omega_R$  と比較して小さいように、空洞離調を駆動のラビ周波数の近くに設定することができる。相互作用ハミルトン関数において2次の回転波近似を行うことにより、このハミルトン関数は、次式の空洞とスピンの間の  $x$  基底の  $H_{\pm\Omega_R}$  フリップフロップ交換相互作用に還元される。 30

$$H_I(t) = \frac{ig}{2} \left( e^{i\Delta t} a J_+^{(x)} - e^{-i\Delta t} a^\dagger J_-^{(x)} \right)$$

この回転波近似は、離調及びラビ駆動強度が、着目する時間尺度  $t_c$  と比較して大きい領域 ( $\Omega_R \gg 1/t_c$ ) 内で有効である。ここから、上付文字 (x) を外すことにし、着目するスピン集団に対して  $J_x$  固有ベースにおいて考察を進めることに注意しなければならない。 40

【0060】

一部の実施では、スピン空洞交換相互作用を単離することにより、2つの系の間の効率的なエネルギー移送が可能になり、これらの2つの系が、制御場の相互作用フレーム内で共同平衡状態に緩和することが許される。集団スピン空洞結合のコヒーレントな強化は、角運動量部分空間  $V_J$  におけるスピン偏極を熱緩和速度を有意に超える速度で強化することができる。図3は、スピン空洞状態の結合エネルギーレベルに関してこのコヒーレントな強化を示している。

【0061】

図3は、2レベル空洞に結合されたスピンに関する2つの例示的エネルギーレベル図302、304を示している。両方の図において、ケット  $|+0\rangle$  は、スピン空洞系の基底状 50

態を表し（この場合に、スピン及び空洞は、そのそれぞれの基底状態にある）、ケット  $| - 1 \rangle$  は、スピン空洞系の励起状態を表し（この場合に、スピン及び空洞は、そのそれぞれの励起状態にある）、更にケット  $| + 1 \rangle$  及び  $| - 0 \rangle$  は中間状態を表している。図3では、直線矢印はコヒーレント振動を表し、曲線矢印は空洞散逸を表している。

【0062】

図3は、空洞離調がラビ駆動強度に適合される時に、スピンと空洞の間のエネルギー交換遷移が促進されることを示している。左にあるエネルギーレベル図302は、制御駆動によって与えられるコヒーレントな促進を伴わない遷移を示している。右にあるエネルギーレベル図304は、 $\Omega = \Omega_R$  が  $\Omega < \Omega_R$  と比較して小さい時に、制御駆動によって与えられるコヒーレントな促進を有する遷移を示している。左にあるエネルギーレベル図302に示すように、制御駆動を伴わない場合に、全ての遷移経路が可能である。右にあるエネルギーレベル図304は、ラビ駆動が作動状態にされ、空洞離調がラビ周波数に適合された時に、スピンと空洞の間のエネルギー交換遷移が促進されることを示している。

10

【0063】

下記の説明では、スピン系の空洞誘起冷却をモデル化するために、空洞及びスピン集団の開放量子系説明を使用する。スピン空洞合同動特性は、スピン集団だけに対して作用する有効な散逸子の導出を可能にする時間畳み込みなし(TCL)のマスター方程式形式を用いてモデル化することができる。スピン部分空間  $V_J$  はTCハミルトン関数によって結合されないため、状態空間ファクタ分解におけるJの全ての値に対して以下に続く導出が与えられる。

20

【0064】

例示的スピン空洞系の推移は、次式のLindbladマスター方程式によって説明することができる。

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}_I(t)\rho(t) + \mathcal{D}_c\rho(t),$$

式中の  $\mathcal{L}_I$  は、相互作用ハミルトン関数の下での推移を説明する超演算子  $\mathcal{L}_I(t) = -i[H_I(t), \cdot]$  であり、 $\mathcal{D}_c$  は、次式のように、空洞の品質係数を現象学的に光子振幅減衰チャンネルとして説明する散逸子である。

$$\mathcal{D}_c = \frac{\kappa}{2} \left( (1 + \bar{n})D[a] + \bar{n}D[a^\dagger] \right),$$

30

この場合に、関数

$$D[A](\rho) = 2A\rho A^\dagger - \{A^\dagger A, \rho\}$$

、

$$\bar{n} = \text{tr}[a^\dagger a \rho_{sq}]$$

は、環境の温度（例えば、冷却システム又は他の環境）を特徴付け、 $\kappa$  は、空洞散逸速度（ $1/Q$ ）である。数演算子の予想値は、環境の温度  $T_c$  に次式によって関連付けられる。

40

$$\bar{n} = (e^{\omega_c/k_B T} - 1)^{-1} \Leftrightarrow T = \frac{\omega_c}{k_B} \left[ \ln \left( \frac{1 + \bar{n}}{\bar{n}} \right) \right]^{-1},$$

式中の  $k_B$  はボルツマン定数である。

【0065】

散逸子の相互作用フレーム内のスピン集団の縮約動特性は、次式のTCLマスター方程式によって2次で与えられる。

$$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = \int_0^{t-t_0} d\tau \text{tr}_c[\mathcal{L}_I(t)e^{\tau\mathcal{D}_c}\mathcal{L}_I(t-\tau)\rho_s(t) \otimes \rho_{\text{eq}}],$$

式中の  $\rho_s(t) = \text{tr}_c[\rho(t)]$  は、スピン集団の縮約状態であり、 $\rho_{\text{eq}}$  は、空洞の平衡状態である。

$$\kappa \gg g\sqrt{N_s}$$

という条件下では、このマスター方程式は次式に還元される。

$$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = \frac{g^2}{4} \int_0^{t-t_0} d\tau e^{-\kappa\tau/2} (\cos(\Delta\tau) \mathcal{D}_s \rho_s(t) - \sin(\Delta\tau) \mathcal{L}_s(t) \rho(t)),$$

10

この場合に、次式は、空洞との結合に起因してスピン集団に対して作用する有効な散逸子及びハミルトン関数である。

$$\mathcal{D}_s = (1 + \bar{n})D[J_-] + \bar{n}D[J_+]$$

$$\mathcal{L}_s \rho = -i[H_s, \rho]$$

20

$$H_s = (1 + \bar{n})J_+J_- - \bar{n}J_-J_+$$

【 0 0 6 6 】

$$\kappa \gg g\sqrt{N_s}$$

という条件下では、次式の駆動スピン集団に対するマルコフマスター方程式を達成するために、上式内の積分の上限を無限大とすることができる。

$$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = \left( \Omega_s \mathcal{L}_s + \frac{\Gamma_s}{2} \mathcal{D}_s \right) \rho_s(t)$$

30

この場合に、次式が成り立つ。

$$\Omega_s = -\frac{g^2\Delta}{\kappa^2 + 4\Delta^2}, \quad \Gamma_s = \frac{g^2\kappa}{\kappa^2 + 4\Delta^2}.$$

この場合に、 $\Omega_s$  は、有効ハミルトン関数の周波数であり、 $\Gamma_s$  は、スピン系の有効散逸速度である。

【 0 0 6 7 】

40

ここで、結合された角運動量ベースで対角であるスピン状態の推移

$$\rho(t) = \sum_J \sum_{m=-J}^J P_m(t) \rho_{J,m}$$

を考察することができる。この場合に、 $J$  にわたる和は、部分空間  $V_J$  にわたって和を取ったものであり、 $P_{J,m}(t) = \langle J, m | \rho(t) | J, m \rangle$  は、状態  $|J, m\rangle = |J, m\rangle_{\langle J, m |}$  内で時間  $t$  においてこの系を見出す確率である。この場合に、マルコフマスター方程式は、次式の占有率に対する速度方程式に還元される。

$$\frac{d}{dt}P_{J,m}(t) = \Gamma_s \left( A_{J,m+1}P_{J,m+1}(t) + B_{J,m}P_{J,m}(t) + C_{J,m-1}P_{J,m-1}(t) \right),$$

この場合に、次式が成り立つ。

$$A_{J,m} = (1 + \bar{n})[J(J+1) - m(m-1)]$$

$$C_{J,m} = \bar{n}[J(J+1) - m(m+1)]$$

10

$$B_{J,m} = -(A_m + C_m).$$

ここで

$$\vec{P}_J(t) = (P_{J,-J}(t), \dots, P_{J,J}(t))$$

を定めると、各部分空間  $V_J$  に対して以下の行列微分方程式が得られる。

$$\frac{d}{dt}\vec{P}_J(t) = \Gamma_s M_J \vec{P}_J(t),$$

20

式中の  $M_J$  は、次式の三重対角行列である。

$$M_J = \begin{pmatrix} B_{J,-J} & A_{J,-J+1} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ C_{J,-J} & B_{J,-J+1} & A_{J,-J+2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & C_{J,-J+1} & B_{J,-J+2} & A_{J,-J+3} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & \dots & & 0 & C_{J,J-1} & B_{J,J} \end{pmatrix}.$$

【 0 0 6 8 】

初期占有率

30

$$\vec{P}_J(0)$$

によって指定される与えられた状態に対して、上述の微分方程式は、解

$$\vec{P}_J(t) = \exp(t\Gamma_s M_J) \vec{P}_J(0)$$

を有する。駆動スピン集団の各部分空間  $V_J$  の平衡状態は、

$$M_J \cdot \vec{P}_J(\infty) = 0$$

40

を満たし、次式によって与えられる。

$$\rho_{J,eq} = \sum_{m=-J}^J P_{J,m}(\infty) \rho_{J,m}$$

この場合に、次式が成り立つ。

$$P_{J,m}(\infty) = \frac{\bar{n}^{J+m}(1+\bar{n})^{J-m}}{(1+\bar{n})^{2J+1} - \bar{n}^{2J+1}}.$$

50

スピン集団の平衡状態に対する合計スピン予想値は次式で与えられる。

$$\langle J_x \rangle_{sq} = -J + \bar{n} - \frac{(2J + 1)\bar{n}^{2J+1}}{(1 + \bar{n})^{2J+1} - \bar{n}^{2J+1}}$$

【 0 0 6 9 】

$$N_s \gg \bar{n}$$

の限界にある全対称ディッケ部分空間を考察すると、平衡における基底状態占有率は、  
 $P_{N_s/2, -N_s/2} \approx 1/(1 + \bar{n})$

10

によって与えられ、最終予想値は、約

$$\langle J_x \rangle_{sq} \approx -N_s/2 + \bar{n}$$

である。従って、ディッケ部分空間内の最終スピン偏極は、熱空洞偏極にほぼ同等である。

【 0 0 7 0 】

上述の例において離調  $\Delta$  が負であった場合に、 $\rho_R = \rho_L$  という一致の結果として、  
 $H_+$ 、 $H_-$ 項が優勢になり、演算子  $J_-$  と  $J_+$  とが入れ替えられたマスター方程式が誘導され、  
その動特性は、スピン集団を  $\langle J_x \rangle = J$  状態に向けて駆動することになることに注意しな  
なければならない。スピン系を高エントロピー熱混合状態に駆動することになる  $H_-$ 、  
 $H_+$ 、 $H_-$ 項の間の競争を防ぐために、離調を空洞線幅よりも大きくすることができる。

20

【 0 0 7 1 】

一部の実施では、離調  $\Delta = \omega_c - \omega_s$  が負の値であるように、空洞共鳴周波数 ( $\omega_c$ )  
は、スピン共鳴周波数 ( $\omega_s$ ) よりも低く設定される。そのような場合に、本明細書に説  
明する技術を実用ベースのスピン加熱を実施してスピン集団の偏極を増大するために使用  
することができる。そのような場合に、スピン集団のエネルギーは、空洞とスピン集団の  
相互作用によって高められる。

【 0 0 7 2 】

速度行列の三重対角性は、

$$\vec{P}_J(t) = \exp(t\Gamma_s M_J) \vec{P}_J(0)$$

30

を多数のスピンに対して効率的にシミュレートすることを可能にする。簡略化のために、  
空洞がその基底状態

$$(\bar{n} = 0)$$

まで冷却され、スピン集団を最大に混合される (すなわち、 $m = -J, \dots, J$  に対し  
て  $P_m(0) = 1 / (2J + 1)$  である) ものを見なす理想的な場合のディッケ部分空間  
の冷却を考察する。

【 0 0 7 3 】

40

図 4 は、例示的空洞冷却スピン集団のディッケ部分空間に関する正規化予想値  $\langle J_x \rangle / J$   
( $t$ ) の疑似推移を示すプロット図 400 である。プロット図 400 では、縦軸 4  
02 は、ディッケ部分空間に関する正規化予想値  $\langle J_x \rangle / J$  の値範囲を表して  
おり、横軸 404 は、時間値範囲を表している。図 4 では、縦軸 402 によって表す予想  
値は、1 という最大値を達成するために  $J$  によって正規化され、横軸 404 によって表す  
時間変数は、スピン集団に関する有効散逸速度  $\gamma_s$  によって調整されている。

【 0 0 7 4 】

プロット図 400 は 4 つの曲線を含み、各曲線は、 $N_s = 10^2$  から  $N_s = 10^5$  の範囲に  
わたる異なる合計スピン数  $N_s$  を有するスピン集団のディッケ部分空間に関するシミュレ  
ーション予想値  $\langle J_x \rangle / J$  ( $t$ ) を表している。曲線 406 a は、 $10^2$  個のスピンから構

50

成されるスピン集団を表し、曲線 406b は、 $10^3$ 個のスピンから構成されるスピン集団を表し、曲線 406c は、 $10^4$ 個のスピンから構成されるスピン集団を表し、曲線 406d は、 $10^5$ 個のスピンから構成されるスピン集団を表している。

【0075】

$\langle J_x(t) \rangle / J = 1$  という値において、スピン集団の全角運動量部分空間は、 $J$  × 基底固有状態  $|J, -J\rangle$  に完全に偏極される。図 4 に示すように、各スピン集団の偏極は時間と共に強まり、この偏極は、大きいスピン集団ではより高速に増大される。図示の例では、3つの大きい方のスピン集団は、プロット図 400 に示す時間尺度の範囲で実質的に完全に偏極されている。

【0076】

一部の場合に、熱スピン格子緩和時間  $T_1$  と同様に、予想値  $\langle J_x(t) \rangle$  対時間を有効冷却時定数  $T_{1,eff}$  を駆動する指数関数に当て嵌めることができる。次式によって与えられるモデルへの当て嵌めは、 $\kappa = 2.0406$  及び  $\Delta = 0.9981$  であるパラメータ  $T_{1,eff} = (2J) / \Gamma_s$  をもたらす。

$$-\frac{\langle J_x(t) \rangle}{J} = 1 - \exp\left(-\frac{t}{T_{1,eff}}\right)$$

このモデルは、指数関数的速度 ( $1/T_1$ ) を含む熱スピン格子緩和過程と同じく指数関数的速度 ( $1/T_{1,eff}$ ) を含む。このモデルは、角運動量部分空間 (例えば、ディッケ部分空間) 又は完全ヒルベルト空間に対して使用することができる。一部の実施では、有効速度 ( $1/T_{1,eff}$ ) は、熱速度 ( $1/T_1$ ) よりも有意に速い。スピン部分空間  $V_J$  に対する冷却時定数に関する、 $J$  の関数としての近似表現式は次式で与えられる。

$$T_{1,eff}(J) \approx \frac{2}{\Gamma_s J_s} = \frac{2(\kappa^2 + 4\Delta^2)}{g^2 \kappa J}$$

この有効冷却時定数内では、ラビ駆動強度が空洞離調に一致する時 (すなわち、 $\Delta = 0$ ) に冷却効率が最大になる。この場合に、冷却速度及び時定数は、それぞれ  $\Gamma_s = g^2 / J$  及び  $T_{1,eff} = J / g^2$  に簡略化される。空洞が熱的に占有される場合に、最終スピン偏極は熱空洞偏極にほぼ等しく、

$$\bar{n} < \sqrt{2J}$$

に対応する空洞温度では、有効冷却定数  $1/T_{1,eff}$  は、ゼロ温度値にほぼ等しい。

【0077】

上述の有効冷却定数  $1/T_{1,eff}$  に対応する速度で試料を偏極する方式で、磁気共鳴システムを制御することができる。磁気共鳴システムは、スピン空洞交換項  $H_1(t)$  を単離するのに使用される 2つの回転波近似を厳守するパラメータに従って構成することができる。

$$\delta\omega \approx \Omega_R$$

である実施では、磁気共鳴システムは、

$$g\sqrt{N_s} \ll \kappa \ll \Omega_R, \delta\omega \ll \omega_c, \omega_s$$

であるように構成することができる。

【0078】

Xバンドパルス電子スピン共鳴 (ESR) (

$$\omega_c/2\pi \approx \omega_s/2\pi =$$

$10\text{ GHz}$ ) を約  $N_s = 10^6$ 個から  $N_s = 10^{17}$ 個までのスピンを閉じ込める試料と共に

10

20

30

40

50

使用する例示的实施では、磁気共鳴システムは、 $\nu_R / 2 = 100 \text{ MHz}$ 、 $Q = 10^4$  ( $\nu / 2 = 1 \text{ MHz}$ )、及び  $g / 2 = 1 \text{ Hz}$  であるように構成することができる。これらのパラメータでは、マルコフマスター方程式の有効性範囲は  $N_s \cdot 2g^2 = 10^{12}$  であり、約  $10^{11}$  個の電子スピンを含む集団のディッケ部分空間を  $3.18 \mu\text{s}$  の有効な  $T_1$  で偏極することができる。この偏極時間は、数秒から数時間の範囲にわたる可能性がある、低温スピン集団に対する熱  $T_1$  よりも有意に短い。

【0079】

図5は、2レベル空洞に結合された例示的スピン系のエネルギーレベル図500である。コヒーレント遷移を実線で表しており、空洞散逸速度を曲線で表している。各部分空間  $V_J$  内の状態を  $|n\rangle_c | -J_x + m \rangle_s$  でラベル付けし、この場合に、 $m$  はスピン励起数であり、 $n$  は空洞励起数である。各部分空間  $V_J$  内では、冷却動特性がマルコフ関数で表現されるようにするには、高空洞励起数の状態は、粗視化された時間尺度において有意な占有率を有してはならない。

10

【0080】

本明細書に示す例では、スピン集団は、その偏極を増大する空洞とのコヒーレント相互作用によって冷却される。これらの空洞ベースの冷却技術は、スピン集団を通してコヒーレントな過程を含むので、例えば、熱  $T_1$  緩和とは異なる。熱  $T_1$  緩和は、 $T_1$  が長い時に弱く結合される個々のスピンと環境との間でエネルギーを交換する段階を有するインコヒーレント過程である。空洞ベースの冷却技術は、空洞をスピン集団と環境の間の接続体として使用することにより、熱環境へのスピンの結合の被制御強化を与えることができる。空洞は、スピン集団よりも環境に強く結合され、従って、エネルギーが光子の形態でより急速に散逸する。空洞への個々のスピンの本質的に小さい結合に起因して、スピン集団をそれが空洞への非常に強い結合を有する単一双極子モーメントとして空洞と集合的に相互作用するように駆動することにより、空洞をスピン集団に効率良く結合することができる。一部の場合に、得られるスピン集団と環境の間の空洞にわたる接続は、空洞が不在の場合のスピン集団と環境の間の接続よりも有意に強く、その結果、この冷却アルゴリズム及び短い有効  $T_1$  を使用する場合はスピン集団からのエネルギー散逸の高い効率もたらされる。

20

【0081】

上述の解説は、ディッケ部分空間及び他の部分空間が、空洞ベースの冷却技術によって如何にして偏極されるかを示している。次いで、全体の状態を如何にして冷却することができるかを説明する。大域的  $SU(2)$  対称性に起因して、スピン集団の状態空間は、スピンに対する結合角運動量部分空間にファクタ分解される。最も大きい次元の部分空間をディッケ部分空間 ( $N$  がスピン数である時に角運動量  $J = N / 2$  に対応する) と呼ぶ。例えば、以下の通りである。

30

2個のスピン：

$$(\text{スピン} - \frac{1}{2})^{\otimes 2} \rightarrow \text{スピン} - 1 (\text{triplet}) \oplus \text{スピン} - 0 (\text{シングレット})$$

3個のスピン：

$$(\text{スピン} - \frac{1}{2})^{\otimes 3} \rightarrow \text{スピン} - \frac{3}{2} \oplus \text{スピン} - \frac{1}{2} \oplus \text{スピン} - \frac{1}{2}$$

40

図6に示すように、3個のスピンの場合に、スピン  $3 / 2$  部分空間が最も大きい次元を有し、従って、ディッケ部分空間である。

【0082】

図6は、3スピンヒルベルト空間として表した例示的状态空間の図600である。図600は、3スピンヒルベルト空間の行列表現である。行列は、対角に沿う各ブロックが特徴的な部分空間を表すブロック対角形式を有する。第1のブロックは、スピン  $3 / 2$  部分空間602を表し、第2及び第2のブロックはスピン  $1 / 2$  部分空間604a、604bを表している。図6では、スピン  $3 / 2$  部分空間602が、最も大きい次元の部分空間で

50

あることでディッケ部分空間である。空洞ベースの冷却は、各それぞれの部分空間をそのそれぞれの基底状態まで冷却することができる。特徴的な部分空間には、ヒルベルト空間のSU(2)対称性を破壊する相互作用が結合することができ、空洞ベースの冷却は、スピン系を全体のヒルベルト空間の真の基底状態まで冷却することができる。図6に示す例示的な3個のスピンの場合に、真の基底状態は、スピン3/2部分空間602に存在する。

【0083】

空洞ベースの冷却は、各部分空間に対して個々に作用することができ、各部分空間を次式の有効緩和時間を有するそれぞれの基底状態に結合する。

$$T_{1,J} = \frac{1}{\Gamma_s J}$$

10

式中のJは部分空間のスピンであり、 $\Gamma_s$ は、マルコフマスター方程式から導出された空洞冷却速度である。一部の例では、スピン集団の真の基底状態は、全てのスピンのB<sub>0</sub>磁場に位置合わせするか、又は逆位置合わせするかのいずれかの状態であり、この状態はディッケ部分空間である。一般的に熱平衡では、スピン集団は混合状態にあることになり、全て又は実質的に全ての部分空間内に占有率を有する状態の分布が存在することになる。

【0084】

スピン集団の真の基底状態(又は一部の場合は別の状態)は、スピンJ部分空間の間の結合によって達することができる。この結合は、例えば、図1Cに関して上述したように、系のハミルトン関数の大域的SU(2)対称性を破壊する相互作用によって達成することができる。一部の例では、この対称性を破壊するには、スピン間の経時的な双極子双極子相互作用、T<sub>2</sub>緩和、外部勾配場、又は類似の外部又は内部の脱位相相互作用で十分である。

20

【0085】

一部の実施では、この対称性を破壊する摂動の存在下で冷却アルゴリズムを適用することにより、真の基底状態への冷却が可能になる。双極子双極子相互作用場合に、ディッケ部分空間の冷却速度のほぼ

$$\sqrt{N_s}/2$$

30

倍の比でスピンを真の基底状態まで冷却することができることをシミュレーションが示している。それによって次式の真の基底状態への有効な緩和時間が与えられる。

$$T_{1,双極子} = \frac{1}{\Gamma_s \sqrt{N_s}}$$

上述の他の例の場合と同様に、熱スピン格子緩和速度(1/T<sub>1</sub>)と同様の指数関数的速度(1/T<sub>1,双極子</sub>)を含むモデルを考察する。

40

【0086】

図7は、例示的スピン集団に対して計算された有効冷却時間を示すプロット図700である。プロット図700は、冷却時間の範囲を秒の単位に示す対数尺度縦軸702と、スピン集団内のスピン数N<sub>s</sub>に関する値範囲を示す対数尺度横軸704とを含む。プロット図700には3つの曲線が示されている。曲線708は、熱T<sub>1</sub>緩和過程の下での例示的スピン集団に関する冷却時間を表している。他の2つの曲線は、上述の非熱でコヒーレントな空洞ベースの冷却過程の下での同じ例示的スピン集団に関する冷却時間を表している。具体的には、曲線706aは、スピン集団が真の基底状態に達するための有効冷却時間を表しており、曲線706bは、ディッケ部分空間がその基底状態に達するための有効冷却時間を表している。

50

## 【 0 0 8 7 】

図7は、XバンドESRシステムにおける電子スピン集団のモデルに基づいて発生させたものである。これらの計算のための用いたモデルでは、共鳴器とスピン集団とは両方共に液体ヘリウム温度(4.2 K)まで冷却される。この温度での典型的な熱 $T_1$ は、照射石英の試料では3秒である。熱 $T_1$ は、図7の曲線706aに示すように、試料中のスピン数には依存しない。

## 【 0 0 8 8 】

空洞ベースの冷却を受ける試料のディック部分空間に対する有効冷却時定数を示す図7の曲線706bを達成するために、10 GHzのスピン共鳴周波数を有するスピン系に対してマルコフマスター方程式を解いた。計算に用いたモデルは、1 Hzの空洞スピン結合、1 MHzの空洞散逸速度、共鳴器のバンド幅を外れた空洞離調、及びこの離調に等しいラビ駆動強度を含むものであった。双極子相互作用を有する空洞ベースの冷却の下での完全スピン集団に対する有効冷却時定数を示す図7の曲線706aを達成するために、結果を少数のスピンに基づいて、より大きい個数に外挿したものとした。最初の究明結果は、次式が成り立つことを示唆している。

$$T_{1, \text{eff}} \approx \sqrt{N_s} T_{1, \text{ディック}}$$

上述のように、指数関数的速度( $1/T_1$ )に従って推移する熱スピン格子緩和過程と同じく指数関数的速度( $1/T_{1, \text{eff}}$ )に従って推移するスピン偏極モデルを考察する。

## 【 0 0 8 9 】

図7に示す例では、最初に試料がディック部分空間に限定される場合に、空洞ベースの冷却は、 $10^5$ 個よりも多いスピンから構成される試料に対して熱 $T_1$ に優る時間短縮を与える。完全な混合状態にある試料を考察すると、スピン集団の空洞ベースの冷却を実施すると同時に双極子相互作用を含めることにより、 $10^{10}$ 個よりも多いスピンから構成される試料に対して熱 $T_1$ に優る時間短縮が得られる。

## 【 0 0 9 0 】

上記に提供したスピン集団の空洞ベースの冷却に対するモデルでは、例示目的で一部の仮定が行われた。一部の事例では、これらの仮定のうちの1つ又はそれよりも多くが厳守されない系において、上述の結果及び利点を達成することができる。第1に、スピン集団が磁氣的に希薄であり、従って、スピン間に結合が存在しないと仮定した。Tavis-Cammings(TC)ハミルトン関数の大域的SU(2)対称性を破壊するスピンスピン相互作用は、状態空間の結合角運動量の分解においてスピンJ部分空間を接続することになる。そのような相互作用は、完全集団ヒルベルト空間の完全な偏極を可能にしなければならない追加リソースとして使用することができる。第2に、スピン系の熱緩和効果を無視した。一部の事例では、スピン系に対する空洞の冷却効果はコヒーレントなスピン空洞情報交換を拠り所とするので、一般的に $T_{1, \text{eff}}$ と記すラビ駆動のフレーム内のスピン系の緩和時間は、空洞散逸速度の逆数 $1/\gamma$ よりも有意に長いはずである。第3に、スピン空洞結合及びラビ駆動は、スピン集団にわたって空間的に均一であると仮定した。不均一性は、例えば、スピン空洞結合の範囲にわたって一定の強度の有効スピン固定ラビ駆動を実施する制御パルスと制御場の振幅とを数値的に最適化することによって補償することができる。

## 【 0 0 9 1 】

一部の実施では、スピン系からエネルギーを除去する空洞の機能は、空洞を冷却するのに使用される冷却システムの冷却電力に少なくとも部分的に依存する。上記に提供した例示的シミュレーションでは、冷却システムの冷却電力を空洞の無限熱容量に対応して無限であると見なした。本明細書に説明する技術は、空洞が有限熱容量を有するためのシステムにおいて実施することができる。図8A及び図8Bに、例示的な空洞ベースの冷却過程におけるエントロピー及びエネルギーの流れのモデルを提供する。

## 【 0 0 9 2 】

図 8 A は、例示的な空洞ベースの冷却過程におけるエントロピーの流れを示す概略図 8 0 0 である。図 8 0 0 では、スピン 8 0 2 はスピン集団を表し、空洞 8 0 4 は、例えば、上述の条件下でスピン集団に結合される空洞を表し、冷凍機 8 0 6 は、空洞を冷却する冷凍機又は別のタイプの冷却システムを表している。スピン集団から除去されたエネルギーは、空洞に  $\kappa_{SC}$  の速度で流れ、エネルギーは、冷凍機の（有限）冷却電力によって空洞から  $\kappa_{CF}$  の速度で除去される。

【 0 0 9 3 】

図 8 B は、散逸速度  $\kappa_{SC}$  及び  $\kappa_{CF}$  の例示的な値を示すプロット図 8 1 0 である。プロット図 8 1 0 は、冷却電力に関する値範囲をマイクロワット ( $\mu W$ ) の単位で表す縦軸 8 1 2 と、スピン集団内のスピン数  $N_s$  に関する値範囲を示す対数尺度横軸 8 1 4 とを含む。冷凍機 8 0 6 の冷却電力は、プロット図 8 1 0 内に表すシミュレーション内では一定に保持されるので、空洞から冷凍機へのエントロピー除去の速度  $\kappa_{CF}$  は、曲線 8 1 6 a に示すように一定に留まる。曲線 8 1 6 b によって表すスピン集団から空洞へのエントロピー除去の速度  $\kappa_{SC}$  は、スピン系を偏極するためにスピン系から除去される合計エネルギーを本導出による冷却時間に基づいて計算したエネルギーを除去するのにそのような時間で割算したものを決定することによって計算したものである。スピン系から除去される合計エネルギーは、 $2 N_s \hbar \omega$  が  $2 \times 10 \text{ GHz}$  であると見なして、

$$(N_s/2)\hbar\omega$$

として計算したものである。図示の例では、スピン系は、完全混合状態で始まる電子スピン集団であり、従って、スピンの半分をその基底状態まで駆動しなければならない。

【 0 0 9 4 】

空洞内に滞積したエネルギーは、冷凍機により、一部の例示的用途では一般的に数十マイクロワット程度である（図 8 B に示すように）冷凍機の冷却電力に基づく速度で除去される。図 8 B の曲線 8 1 6 b は、約  $10^{13}$  個よりも多い電子スピンの集団では、一部の条件下で、より大きい集団に対して最短冷却時間を制限することになるエントロピー流れの障壁が存在する可能性があることを例証している。しかし、図示の例では、 $50 \mu W$  の冷却電力を有する冷凍機を考えた場合に、 $10^{12}$  個の電子スピンから構成される集団を約  $3.18 \mu s$  で冷却することができる。このサイズの集団は、強い電子スピン共鳴信号を達成するのに十分である。

【 0 0 9 5 】

最後に、上述のマルコフマスター方程式の導出は、冷却過程中に空洞とスピン系の間に相関関係が発生せず、従って、スピン系に対する空洞動特性の逆作用が存在しないと仮定している。この条件は、空洞散逸速度  $\kappa$  が、最低励起マニホールド内のコヒーレントなスピン空洞交換速度を少なくとも 1 桁（すなわち、

$$\kappa \geq 10g\sqrt{N_s}$$

）だけ超える場合に適用される。このマルコフ制限内では、スピン光子が空洞に追加される速度が、熱光子が追加される速度よりも有意に小さく、すなわち、熱空洞温度を維持するのに必要な冷凍機の冷却電力が、空洞の平均占有数を増大させることなくスピン光子を散逸させるのに十分である。上式から、より多くのスピンを追加して  $\kappa$  を

$$g\sqrt{N_s}$$

に近づけることによって冷却効率を改善することができ、この関連において、冷凍機の冷却電力が、空洞からの逆作用を防ぐのに十分ではない場合があり、非マルコフ効果が冷却速度を有意に低下させることを見ることができる。

【 0 0 9 6 】

本明細書は多くの詳細内容を含むが、これらの内容は、主張することができる範囲に対

10

20

30

40

50

する限定と解釈すべきではなく、特殊な例に特定の特徴の説明であると解釈しなければならない。本明細書に別個の実施の状況で記載しているある一定の特徴を組み合わせることができる。それとは逆に、単一実施の状況で記載している様々な特徴を複数の実施形態において分離して、又はあらゆる適切な部分結合に実施することができる。

【0097】

いくつかの独立した一般概念の例示的实施を記述した。上述したものの1つの一般的態様において、静磁場内のスピン集団に駆動場が印加される。駆動場は、スピン集団のスピン状態を空洞の空洞モードと結合するようになっている。スピン集団の偏極は、スピン状態と空洞モードとの間の結合によって増大される。

【0098】

上述したものの別の一般的態様において、空洞が、試料中のスピン集団と結合される。試料は、ある熱温度に保持して静磁場を掛けることができ、空洞とスピン集団の間の相互作用が発生する(例えば、駆動場を印加することにより)。相互作用は、スピン集団の偏極を試料に影響を及ぼす内部偏極過程よりも高速に強める。

【0099】

上述の一般概念の一部の実施では、スピン集団の偏極は、スピン状態と空洞モードとの間の結合によってスピン集団の各角運動量部分空間に対して個々に影響を及ぼす空洞ベースの冷却と、角運動量部分空間を混合する混合過程とによって増大される。一部の事例では、上述の作動を反復的に適用することができる。角運動量部分空間は、例えば、双極子相互作用、横断( $T_2$ )緩和過程、勾配場の印加、又はこれら及び他の過程の組合せによって混合することができる。

【0100】

上述の一般概念の一部の実施では、空洞は、低いモード体積と高い品質係数とを有する。モード体積、品質係数、又はこれら及び他の空洞パラメータの組合せは、スピン集団偏極過程を実質的に「短絡」するスピン集団と空洞の間の結合をもたらすように設計することができる。一部の例では、空洞は、

$$\kappa \gg g\sqrt{N_s}$$

であるようなモード体積 $V$ と品質係数 $Q$ とを有する。この場合に、 $N_s$ は、スピン集団内のスピン数を表し、 $\kappa = (\omega_c / Q)$ は、空洞の散逸速度を表し、 $\omega_c$ は、空洞の共鳴周波数を表し、 $g$ は、スピン集団内の個々のスピンへの空洞の結合強度を表している。一部の例では、散逸速度  $\kappa$  は、

$$g\sqrt{N_s}$$

の2倍よりも大きい。一部の例では、散逸速度  $\kappa$  は、

$$g\sqrt{N_s}$$

よりも1桁大きい。一部の例では、散逸速度  $\kappa$  は、

$$g\sqrt{N_s}$$

よりも2桁又は3桁大きい。一部の事例では、スピン集団と空洞の間の結合は、スピン集団の偏極を熱スピン格子( $T_1$ )緩和過程よりも高速に強める。

【0101】

上述の一般概念の一部の実施では、スピン集団はスピン共鳴周波数( $\omega_s$ )を有し、駆動場は、スピン共鳴周波数( $\omega_s$ )と共鳴する共鳴器が発生させる。駆動場は、時変(例えば、振動又は他の方式の時変)磁場とすることができる。一部の場合に、スピン集団は

10

20

30

40

50

原子核スピン集団であり、駆動場は無線周波数場である。一部の場合に、スピン集団は電子スピン集団であり、駆動場はマイクロ波周波数場である。

【0102】

上述の一般概念の一部の実施では、空洞モードは、空洞共鳴周波数 ( $\omega_c$ ) に対応し、空洞共鳴周波数 ( $\omega_c$ ) は、スピン共鳴周波数 ( $\omega_s$ ) から量  $\omega_c - \omega_s$  だけ離調される。駆動場は、ラビ周波数 ( $\omega_R$ ) におけるラビ振動を発生させる駆動場強度を有することができる。一部の場合に、離調  $\omega_c - \omega_s$  は、 $\omega_R$  に実質的に等しい。例えば、差  $\omega_c - \omega_s - \omega_R$  は、離調  $\omega_c - \omega_s$  と比較して小さいとすることができる。一部の実施形態において、差  $\omega_c - \omega_s$  は、離調  $\omega_c - \omega_s$  の半分よりも小さい。一部の例では、差  $\omega_c - \omega_s$  は、離調  $\omega_c - \omega_s$  よりも1桁小さい。一部の例では、差  $\omega_c - \omega_s$  は、離調  $\omega_c - \omega_s$  よりも2桁又は3桁小さい。

10

【0103】

上述の一般概念の一部の実施では、空洞とスピン集団の間の相互作用は、スピン集団の偏極を空洞のパラメータに関する偏極速度で強める。一部の事例では、偏極速度は、品質係数の値、モード体積の値、散逸速度の値、又は別の特性のような空洞の電磁特性に起因してより高いか又はより低いとすることができる。一部の場合に、偏極速度は、空洞とスピン集団内のスピンの間の結合強度  $g$  に関連する。一例として、偏極速度を散逸速度に、以下のように関連付けることができる。

$$\Gamma_s = \frac{g^2 \kappa}{\kappa^2 + 4\Delta^2}$$

20

式中の  $\kappa$  は、空洞の散逸速度を表し、 $g$  は、スピン集団内のスピンへの空洞の結合強度を表し、 $\Delta = \omega_c - \omega_s - \omega_R$  が成り立つ。一部の場合に、偏極速度は、スピン集団内のスピン数  $N_s$  にも関係する。

【0104】

上述の一般概念の一部の実施では、静磁場は、スピン集団に主磁石システムによって印加され、スピン集団にわたって実質的に均一である。駆動場は、静磁場に直交するように向けることができる。例えば、静磁場は、 $z$  軸に沿って向けることができ、駆動場は、 $x$   $y$  平面 ( $z$  軸に直交する) 内に向けることができる。

【0105】

30

上述の一般概念の一部の実施では、空洞との熱接触状態で存在する冷却システムの作動により、空洞から熱エネルギーが除去される。冷却システムは空洞を冷却することができる。一部の場合に、スピン集団は、冷却システム又は空洞の別の熱環境に、スピン光子を散逸させる。

【0106】

上述の一般概念の一部の実施では、駆動場は、共鳴器が発生させる。一部の場合に、共鳴器と空洞とは、共通の構造又はサブシステムとして形成される。例えば、共鳴器と空洞とを共通のマルチモード共鳴器構造内に統合することができる。一部の場合に、共鳴器と空洞は、2つ又はそれよりも多くの別個の構造として形成される。例えば、共鳴器は、第1の共鳴周波数を有するコイル構造とすることができ、空洞は、第2の異なる共鳴周波数を有する別個の空洞構造とすることができる。共鳴器、空洞、又はこれらの両方は、超電導材料及び他の材料を含むことができる。

40

【0107】

上述の一般概念の一部の実施では、スピン集団と空洞の間の結合は、スピン集団の状態を変化させる。例えば、この結合は、スピン集団を最初の(混合)状態から、それよりも強い偏極を有するその後の状態にマッピングすることができる。その後の状態は、混合状態又は純粋状態とすることができる。一部の場合に、その後の状態は、空洞の純度に等しい純度を有する。一部の事例では、結合は、スピン集団を最初の状態から、スピン集団の熱平衡状態に推移させることができる。一般的に熱平衡状態は、試料環境(試料温度及び静磁場強度を含む)によって少なくとも部分的に定められる。一部の事例では、結合は、

50

最初の状態から、熱平衡偏極よりも弱い、等しいか又は強い偏極を有する後続状態に推移させることができる。

【0108】

上述の一般概念の一部の実施では、駆動場は、スピン集団のディッケ部分空間を空洞モードと結合するようになっている。スピン集団の一部の表現形式では、ディッケ部分空間は、それがスピン集団の全ての全対称状態を含むように最も大きい角運動量部分空間として定めることができる。一部の表現形式では、ディッケ部分空間は、 $N_s$ がスピン集団内のスピン数である時に、合計角運動量  $J = N_s / 2$  を有する系に対応する。一部の場合に、スピン集団のディッケ部分空間及び複数の他の角運動量部分空間は、空洞モードと結合される。一部の場合に、スピン集団の全ての角運動量部分空間が空洞モードと結合される。

10

【0109】

上述の一般概念の一部の実施では、空洞とスピン集団の間の相互作用は、スピン集団をして光子を空洞モードを通して熱環境に散逸させる。この相互作用は、空洞とスピン集団の間のコヒーレント放射相互作用を含むことができる。一部の場合に、コヒーレント放射相互作用は、スピン集団に影響を及ぼすいずれかのインコヒーレント熱過程（例えば、熱スピン格子緩和、自然放出等）よりも高速にスピン集団の偏極を増大することができる。一部の場合に、この相互作用は、スピン集団をそれが単一双極子モーメントとして集合的に空洞と相互作用するように駆動する。

【0110】

20

いくつかの実施形態を記述した。それにも関わらず、様々な修正を加えることができることは理解されるであろう。従って、他の実施形態は、以下に続く特許請求の範囲内である。

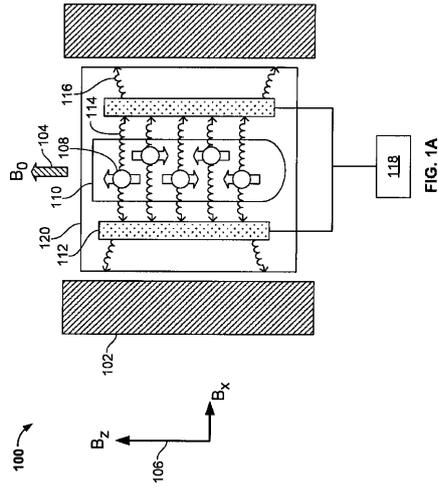
【符号の説明】

【0111】

- 100 磁気共鳴システム
- 102 主磁石システム
- 104 静磁場
- 108 スピン
- 110 試料

30

【図1A】



【図1B】

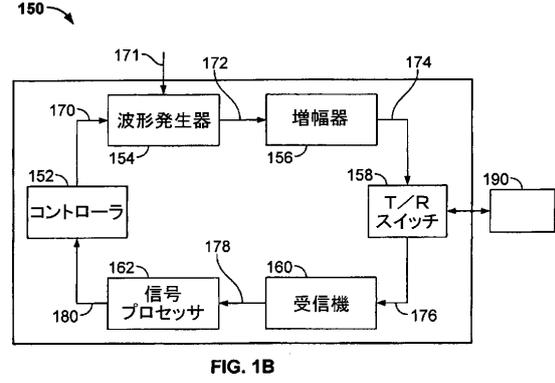


FIG. 1B

【図1C】

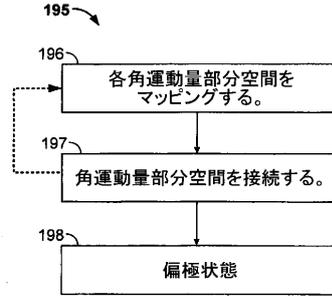


FIG. 1C

【図2】

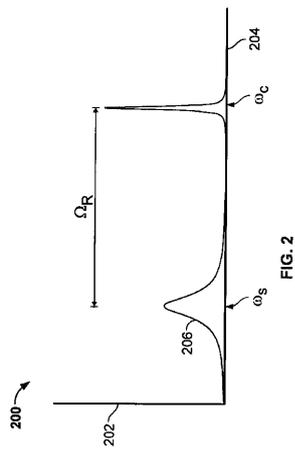


FIG. 2

【図3】

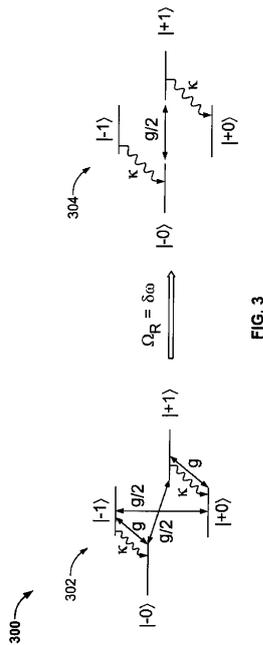


FIG. 3

【 図 4 】

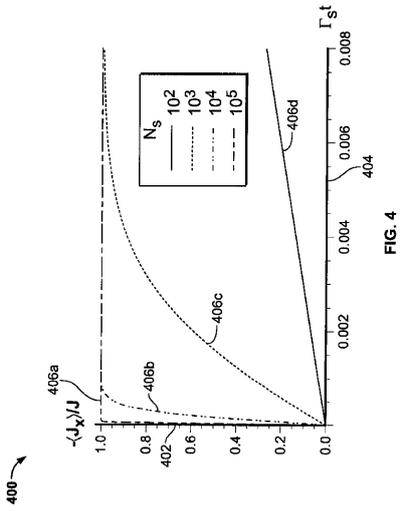


FIG. 4

【 図 5 】

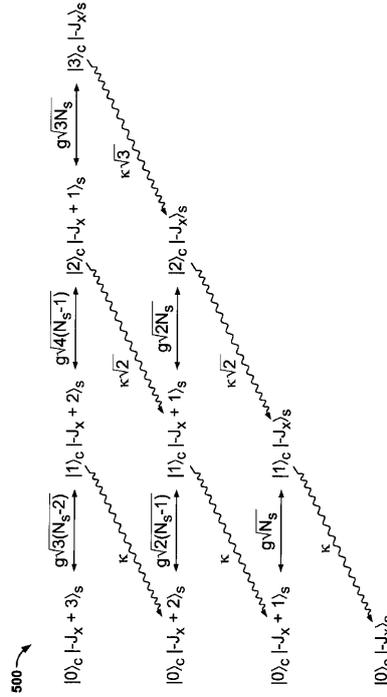


FIG. 5

【 図 6 】

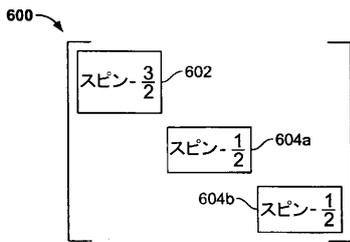


FIG. 6

【 図 7 】

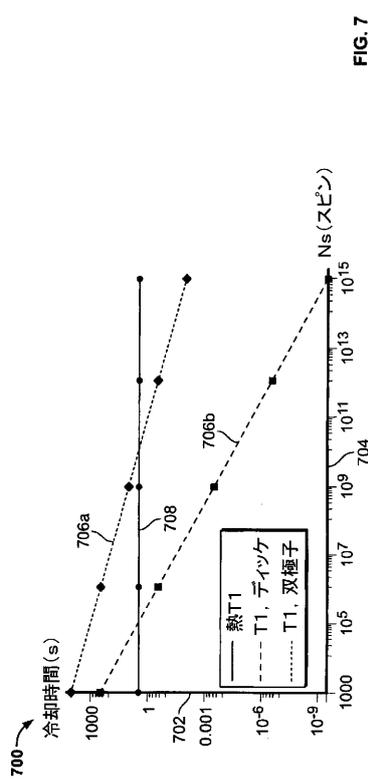


FIG. 7

【図 8 A】

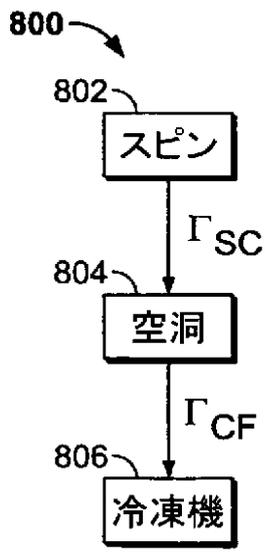


FIG. 8A

【図 8 B】

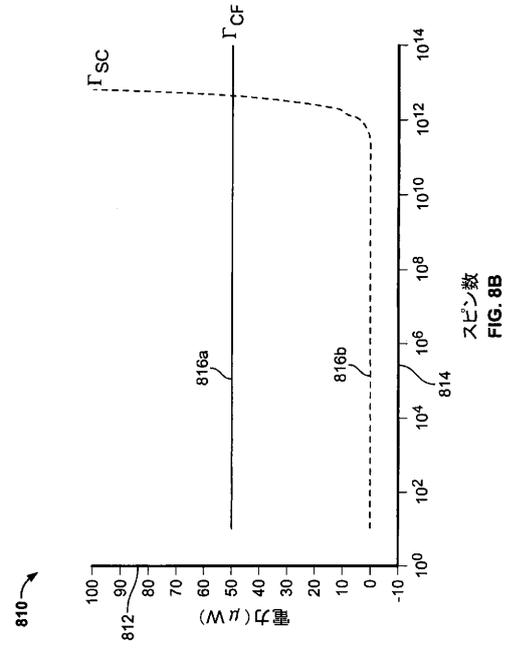


FIG. 8B

## フロントページの続き

- (74)代理人 100109070  
弁理士 須田 洋之
- (74)代理人 100109335  
弁理士 上杉 浩
- (74)代理人 100120525  
弁理士 近藤 直樹
- (72)発明者 ボルネマン トロイ ダブリュー  
カナダ オンタリオ エヌ2ジェイ 1ビー9 ウォータールー ユニオン ストリート イース  
ト 57 アパートメント 704
- (72)発明者 コリー ディヴィッド ジー  
カナダ オンタリオ エヌ0ビー 1エル0 ブランチトン ロッキー ロード 1255
- (72)発明者 ウッド クリストファー ジェイムズ  
カナダ オンタリオ エヌ2ジェイ 1エヌ8 ウォータールー キング ストリート サウス  
4 - 12エイ

審査官 田中 秀直

- (56)参考文献 特表2008-528991(JP,A)  
米国特許出願公開第2012/0114851(US,A1)  
特開2009-053199(JP,A)  
特表2008-534976(JP,A)

## (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G01N 24/00 - 24/14  
G01R 33/28 - 33/64  
A61B 5/055