



TDK dolgozat

Vektor magnetometria optikailag detektált mágneses rezonanciával

Göblyös Bence

Témavezető:

Kollarics Sándor
Fizika Tanszék
BME TTK Fizika Intézet

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
2024

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Elméleti háttér	2
2.1. Gyémánt	2
2.2. A nitrogén-vakancia centrum	2
2.3. A nitrogén-vakancia centrum optikai tulajdonságai	4
3. Mérés	9
3.1. Elrendezés	9
3.2. A mérés folyamata	10
4. Szimuláció	12
4.1. Csúcsok meghatározása	12
4.2. Várható rezonanciák	14
4.3. Illesztési hiba	15
4.4. <i>Brute force</i> minimalizálási módszer	15
4.5. Gradiens minimalizálási módszer	17
4.6. Kalibráció	18
5. Eredmények	20
6. Összegzés	24
7. Köszönetnyilvánítás	25
A. Forráskód	30

1. Bevezetés

A nitrogén-vakancia (NV) centrum egy olyan ponthibakomplexum a gyémántkristályban, amelyben a nitrogén egy szénatomot helyettesít, mellette pedig egy vakanciát találunk [1]. A hat elektronból álló rendszer $S=1$ triplett elektronspin-állapotot hoz létre. Az NV centrum spin állapotát optikailag detektált mágneses rezonancia (ODMR) méréssel ki lehet olvasni [2]. A kísérleti technika lényege, hogy az NV centrumok fluoreszcenciáját detektáljuk, miközben változó frekvenciájú mikrohullámú besugárzásnak tesszük ki őket. A fluoreszcens jel rezonánsan megváltozik, amikor a mikrohullámú frekvencia megegyezik a spintriplett alállapotainak átmeneti frekvenciájával. A spintriplett állapot külső mágneses térrel felhasítható, így az alállapotok energiakülönbsége és ennek megfelelően a köztük mérhető átmeneti frekvencia folytonosan változtatható. Az ODMR technikával ezt a frekvenciát mérve az NV centrum alkalmas akár nagyon kicsi külső mágneses terek precíz mérésére.

Az irodalomban ennek sokféle megvalósítását találhatjuk [3], ugyanakkor a kutatás fókuszában extrém alacsony mágneses terek mérése áll, valamint speciális mintanövesztési eljárások kidolgozásával igyekeznek érzékenységet javítani. A gyakorlati alkalmazások szempontjából ugyanakkor fontos lenne millitesla és ennél nagyobb térerősségek esetén is jól működő megoldást adni, ugyanis a kis terekben elterjedten alkalmazott megoldás, miszerint a zérus mágneses terű ODMR spektrum felhasadását linearizálják, nem terjeszthető ki moderált nagyságú terekre sem.

Munkám során kidolgoztam egy algoritmust, ami a mért ODMR spektrumokból numerikus módszerekkel meghatározza a mágneses tér erősségét és irányát a gyémánt egykristály mintában található NV-centrumokhoz viszonyítva. Ez felhasználható mágneses terek mérésére, valamint ismert mágneses térben a vizsgált gyémánt pontos orientációjának meghatározására. A módszer erőssége, hogy tetszőleges nagyságú és irányú mágneses térben működik, ugyanis a rendszert leíró Hamilton-operátor diagonalizációján alapul, szemben az alacsony mágneses terekben alkalmazott linearizációs módszerekkel.

2. Elméleti háttér

2.1. Gyémánt

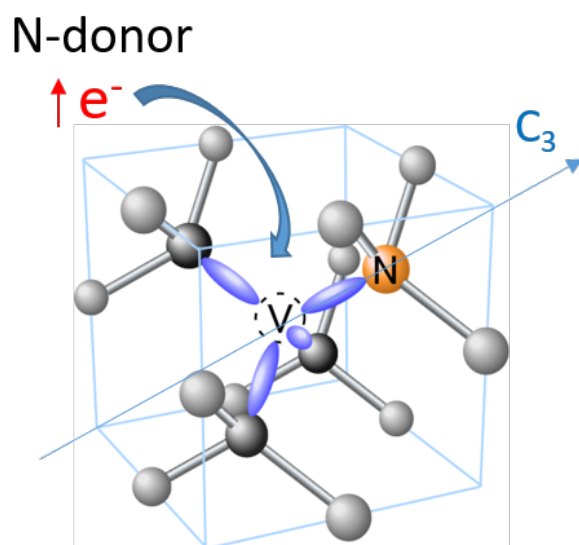
A gyémánt a szén egy allotrop módosulata, melyben a szén atomok tetraédereken helyezkednek el, egymással kovalens kötést létrehozva. A gyémánt széleskörű ipari alkalmazását ebből a felépítésből következő kiváló mechanikai tulajdonságainak köszönheti. Széles tiltott sávja ($\epsilon = 5,5$ eV) miatt elektromos szempontból szigetelő, látható optikai tartományban átlátszó. Szennyező atomokkal mély nívók hozhatók létre, ahogyan azt a természetes gyémánt változatos színárnyalatai is mutatják. A gyémántban az egyik leggyakoribb szennyező atom a nitrogén, ami ha szubsztitúciósan egy-egy szén atom helyére épül be sárga árnyalatot ad a kristálynak.

A gyémánt mesterséges előállítására több módszer is létezik. A "magas nyomás, magas hőmérséklet" [4] (*high pressure, high temperature*, HPHT) módszer a természetes gyémánt keletkezésének körülményeit imitálja. A reaktorban olyan hőmérsékletet és nyomást érnek el, melyben a szén gyémánt állapotában stabil [5]. Egy másik megközelítés a kémiai gőzleválasztás [6–11] (*chemical vapor deposition*, CVD), melynek során egy széntartalmú gáz különböző módszerekkel aktiválásra kerül (például hő által [12, 13] vagy plazmával [14–17]), majd lerakódik a reaktorba helyezett szubsztráton (mely leggyakrabban szilíciumból vagy molibdénből készül). A CVD módszer során a nitrogén finoman adagolható a gázelegyhez és tipikusan 1 ppm alatti koncentrációban jelenik meg a kristályban. Ezzel ellenben a HPHT módszerben jóval nagyobb, tipikusan 100 ppm koncentrációban épül be nitrogén a kristályba, jellegzetes sárga színt kölcsönözve neki. Munkám során ilyen HPHT eredetű kristállyal dolgoztam, amiben előzetesen nagy koncentrációban hoztak létre nitrogén-vakancia centrumokat.

2.2. A nitrogén-vakancia centrum

Az 1. ábrán látható nitrogén-vakancia (NV) centrum egy trigonális (C_{3v}) szimmetriájú ponthibakomplexum a gyémántkristályban. Az NV centrum létrejöttékor a szénatomot helyettesítő nitrogénatom egy vakancia mellett helyezkedik el, mely vagy a gyémánt képződésekor keletkezett, vagy nagy energiájú besugárzással lett utólagosan létrehozva.

A nitrogén két, kötésekben részt nem vevő elektronja és a vakancia melletti három szén atom lógó kötései hozzák létre a semleges NV centrumot. Egy második, közeli nitrogénatom átadhat egy elektront, ezzel létrehozva a negatív töltésű NV^- centrumot. A két töltésállapot közül a negatív centrum



1. ábra. Nitrogén-vakancia centrum sematikus ábrázolása [18]. A szénatomok szürke, a nitrogén narancssárga gömbbel van jelölve, míg a vakanciát egy szaggatott körvonal szimbolizálja. Látható a vakancia és a nitrogén által kijelölt tengelyű C_{3v} szimmetria is.

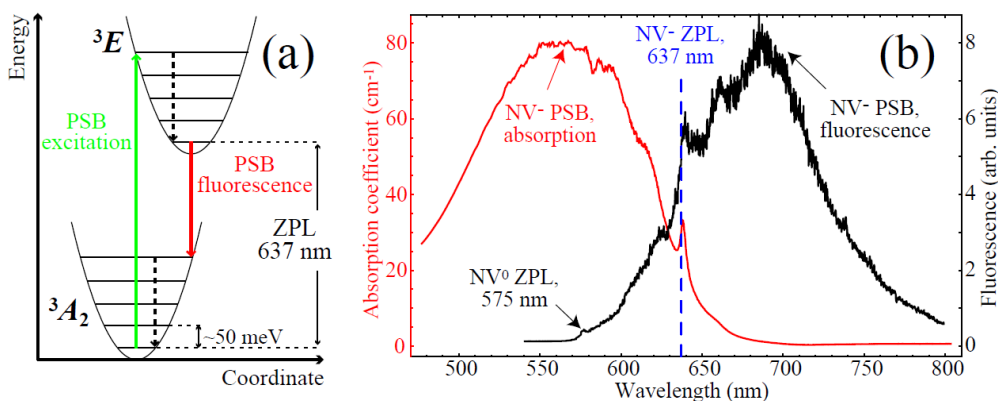
bizonyult alapkutatási és alkalmazási szempontból is érdekesnek. Ez a 2.3 szakaszban tárgyalt tulajdonságainak köszönhető. A továbbiakban a negatív NV centrumról lesz szó.

Bár sok kutatás irányul egységes orientációjú NV centrumok létrehozására [19–22], egy átlagos mintában (a miénket is beleértve) a hibák véletlenszerűen, a négy lehetséges kristályon belüli orientációban találhatók meg.

A korábban említett módszerekkel készített gyémántokban is található néhány NV centrum, viszont tanulmányozásukhoz egyes esetekben szükséges nagy koncentrációjú minták előállítása. A kristály nitrogéntartalma növesztés közben nitrogénforrások hozzáadásával növelhető, míg nagy energiájú besugárzással (elektron, ion, neutron) több vakancia hozható létre a már elkészült gyémántban. A mintát 600 – 1200 °C-os hőkezelésnek alávetve a vakanciák mobilizálhatók. A kristályon belül vándorló vakanciák csapdába eshetnek a szubsztitúciós nitrogénatomok mellett, ezzel növelve az NV centrumok számát.

2.3. A nitrogén-vakancia centrum optikai tulajdonságai

A lumineszcencia egy olyan folyamat, mely során egy gerjesztett állapotban lévő elektron fény kibocsátásával kerül alacsonyabb energiaszintre [23]. A gerjesztett állapot élettartamától függően beszélhetünk fluoreszcenciáról, mely esetén az emisszió szinte azonnali (10 ns alatt), valamint foszforeszcenciáról, ahol az emisszió késleltetett, akár több másodpercig is gerjesztetett állapotban maradhat a rendszer. A gerjesztés forrása szerint is besorolható a lumineszcencia: létezik többek között kemilumineszcencia, mechanolumineszcencia és fotolumineszcencia, melyek kiváltó okai rendre kémia folyamatok, mechanikai behatások vagy fotonok elnyelése. Az NV centrumok abszorpciós és fluoreszcencia spektrumát a 2. ábra szemlélteti, míg a 3. ábrán egy NV centrumokban gazdag gyémánt egykristály minta fluoreszcens fénye látható a gerjesztő zöld fény kiszűrésével.



2. ábra. NV centrum gerjesztésének és fluoreszcenciájának sematikus ábrája, elnyelési és kibocsátási spektruma. Látható, hogy mindkét spektrum a látható tartományban van. Az NV centrum jól gerjeszthető zöld fénnel és fluoreszcenciája a vörös tartományban a legintenzívebb [24].

Az NV centrum alapállapota egy $S = 1$ triplett elektronspin-állapot, amit az elektron spin-spin dipóluskölcsönhatás felhasít $m_S = 0$ és $m_S = \pm 1$ szintekre, ahogyan ez a 4. ábrán is látható. Mivel ez a felhasadás külső mágneses tér nélkül jön létre, zérustér vagy nulltér felhasadásnak hívják. Az optikai gerjesztés után a gerjesztett triplett állapotból relaxáció két úton mehet végbe. A fotolumineszcencia során a rendszer egy látható vörös tartományba eső foton kibocsátásával kerül vissza az alapállapotba, megőrizve spinjét. A másik lehetőség a spin-pálya kölcsönhatás által lehetővé tett rendszerközi átmenet, ami megváltoztatja a spint valamint egy infravörös foton kibocsátásával is jár, de ez utóbbit nem tanulmányoztam munkámban. Bár ez a

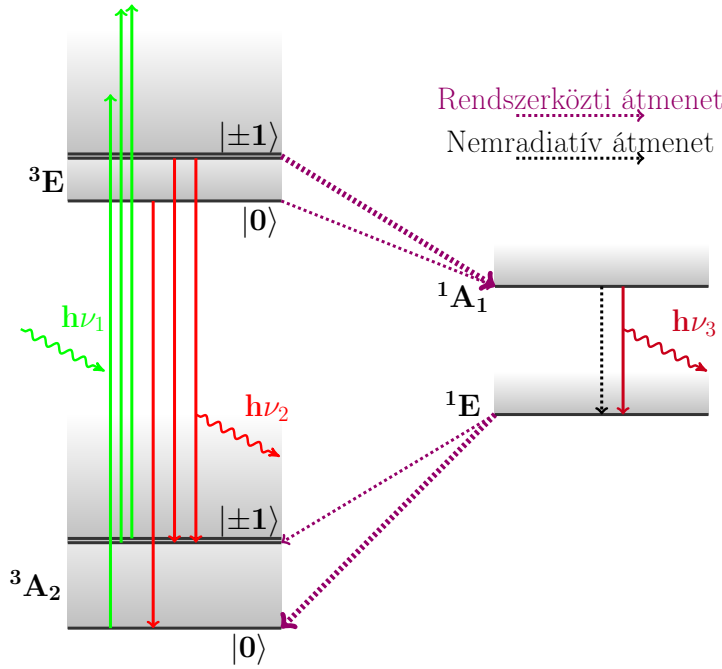


3. ábra. Fluoreszcencia egy NV centrumokban gazdag mintában. A kristály zöld lézerrel való gerjesztés hatására piros fényt bocsát ki. A visszaverődő zöld fényt egy a kamera elé helyezett védőszemüveg szűri ki.

folyamat a $0 \rightarrow \pm 1$ és $\pm 1 \rightarrow 0$ irányba is megtörténhet, az utóbbi nagyobb valószínűséggel zajlik le, így folytonos optikai pumpálás mellett az NV centrumok alapállapotú populációja az $m_S = 0$ állapot felé tolódik el, akár 80%-os polarizációt elérve [25, 26].

Ebből az új egyensúlyi helyzetből kibillenthetjük a rendszert, ha a tripllett alállapotok energiakülönbségének megfelelő energiájú (frekvenciájú) mikrohullámú sugárzásnak tesszük ki azt. Kísérletünkben állandó üzemű mikrohullámú forrás segítségével az alapállapotú tripllett populációját kiegyenlítjük. A mikrohullámú forrás kikapcsolásával pedig a populációk visszaállnak a fény hatására létrejövő értékhez.

A két állapothoz eltérő fluoreszcens intenzitás tartozik, ugyanis a gerjesztett állapot három alállapota eltérő élettartamú. A rezonáns mikrohullámú besugárzás hatására a fluoreszcens intenzitás 0.1 – 1%-ot változik [28]. Ez elegendően nagy ahhoz, hogy a detektor jelét egy oszcilloszkópon megjelenítve, közvetlenül láthassuk a változást, ugyanakkor van egy jobb jel-zaj arányt kínáló megoldás is: A mikrohullámú forrás periodikus ki-be kapcsolásával, vagyis modulációjával a fluoreszcens jel intenzitása periodikusan változik, amit lock-in erősítő segítségével detektálhatunk. Ez az optikailag detektált mágneses rezonancia (ODMR), melynek segítségével látható fénnel működő optikai eszközökkel mérhetjük meg a mikrohullámú energiatartományba eső alállapotú energiaszint-különbségeket.



4. ábra. NV centrum energiaszintjei és átmenetei. A triplett alapállapotból - zöld fény elnyelésével - a szintén triplett gerjesztett állapotba jut a rendszer. Innen vagy fotonkibocsátással jut vissza az alapállapotba, vagy a spin-pálya csatolás által lehetővé tett rendszerközi átmenettel két szinglett állapoton keresztül [27].

Az $m_S = \pm 1$ szinteket egymáshoz képest is felhasíthatják különböző külső behatások, mint a deformáció, elektromos tér [29] és mágneses tér [30]. Ez utóbbit Zeeman-hatásnak nevezik és központi szerepet játszik kutatásunkban.

A megváltozott energiaszinteket az ODMR technikával meg tudjuk határozni, így lehetőség nyílik arra, hogy megmérjük a felhasadást létrehozó mágneses tér erősségét. Kihasználva azt, hogy a mintában 4 különböző orientációjú NV centrum található, meghatározható a mágneses indukcióvektor iránya és hossza is.

Az NV centrum alapállapotát leíró Hamilton operátort ($\hat{H}_1$) felírhatjuk az axiális ($\hat{H}_D$, 2) és rombikus ($\hat{H}_E$, 3) felhasadás, illetve a Zeeman-felhasadás ($\hat{H}_Z$, 4) operátorainak összegeként. Az előbbi kettő tagot valójában az általánosan felírt zérustér felhasadás diagonalizálással kapjuk. A rendszer pontos leírásához szükség van egyéb kölcsönhatások figyelembe vételére is (példá-

ul hiperfinom kölcsönhatás, mag Zeeman-hatás), azonban ezek jóval kisebb energiájú tagokat adnak, így elhanyagolhatónak tekinthetők esetünkben, az egyszerűsített modell elegendő a vizsgált körülmények között.

$$\hat{H} = \hat{H}_D + \hat{H}_E + \hat{H}_Z \quad (1)$$

$$\hat{H}_D = D \left(\hat{S}_Z^2 - \frac{\hat{S}_X^2 + \hat{S}_Y^2 + \hat{S}_Z^2}{3} \right) \quad (2)$$

$$\hat{H}_E = E \left(\hat{S}_X^2 - \hat{S}_Y^2 \right) \quad (3)$$

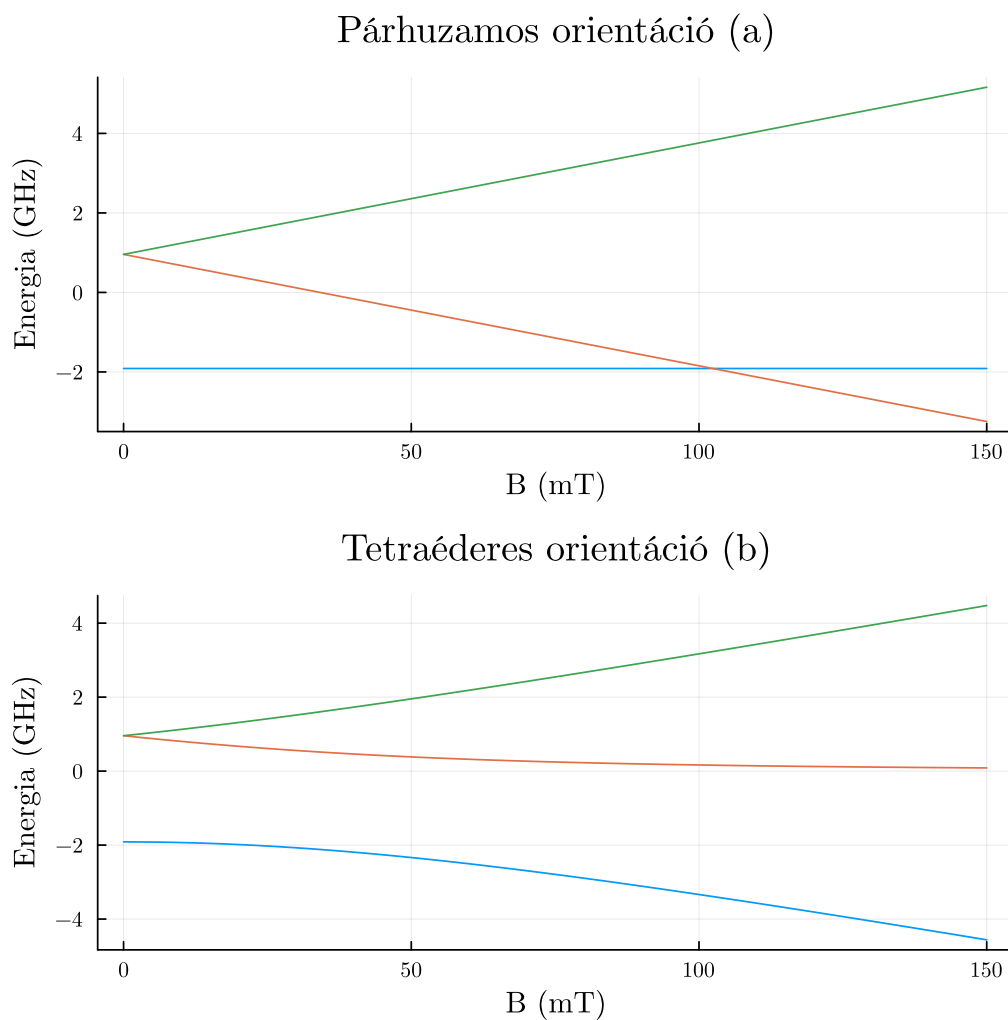
$$\hat{H}_Z = B\mu_B g_e \left(\vec{u}_X \hat{S}_X + \vec{u}_Y \hat{S}_Y + \vec{u}_Z \hat{S}_Z \right) \quad (4)$$

ahol B a mágneses indukció nagysága, $\vec{u}$ a mágneses indukció irányvektora (olyan koordináta-rendszerben, ahol az NV centrum a z tengellyel párhuzamos), g_e az elektron g -faktora, μ_B a Bohr magneton, $\hat{S}_X, \hat{S}_Y, \hat{S}_Z$ pedig az $S = 1$ spinű rendszereket leíró spin operátor komponensei:

$$\hat{S} = \begin{bmatrix} \hat{S}_X \\ \hat{S}_Y \\ \hat{S}_Z \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$\hat{S}_X = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_Y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

Amennyiben a mágneses tér párhuzamos az NV centrummal, a nulltér-felhasadás és a Zeeman-felhasadás operátora közös bázisban van és $\hat{H}$ könnyen diagonalizálható (5/a ábra). Ezek mellett – amennyiben NV sokasággal dolgozunk – megjelenik a három másik, tetraéderes orientációjú NV centrum irány is (degeneráltan), mely már láthatóan nem triviális (5/b ábra). A legtöbb orientációhoz tartozó operátor hasonlóan nem-triviális, így a $\vec{B}$ indukcióvektor visszanyerése a felhasadás mért értékéből vagy egy közelítés használatát, vagy pedig a lehetséges vektorok ellenőrzését igényli. Módszerünk ez utóbbi megoldáson alapul.

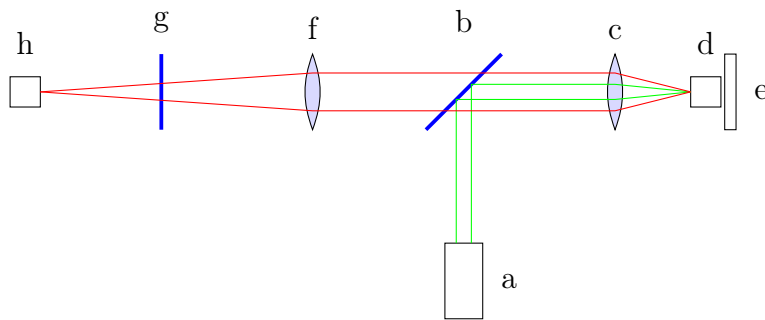


5. ábra. Energiaszintek a külső mágneses térrel párhuzamos (a) és azzal tetraéderes szöget ($109,5^\circ$) bezáró NV centrumok esetén a tér nagyságának függvényében. Egykristály mintákban az NV centrumok a tetraéder négy irányába egyforma valószínűséggel mutathatnak, így egy sokaság mintában az (a) és (b) eset egyszerre valósul meg 1:3 megoszlásban - ennek megfelelően 1:3 ODMR jelintenzitás aránnyal - ha a mágneses teret a tetraéder négy iránya közül eggyel párhuzamossá tesszük.

3. Mérés

3.1. Elrendezés

A méréshez használt minta egy kereskedelmi forgalomban (Element Six Ltd., Egyesült Királyság) kapható nitrogénnel szennyezett gyémánt egykristályból kiindulva, elektronbesugárzással és magas hőmérsékletű hőkezeléssel lett előállítva [31]. Az elkészült mintában közelítőleg 1 ppm koncentrációban találhatók NV centrumok.



6. ábra. Mérési elrendezés sematikus ábrája. A lézer (a) zöld fényét a dikroikus tükör (b) az optikai tengellyel párhuzamosan irányítja, majd egy konvex lencse (c) fókuszálja a mintára (d), mely egy koplanáris hullámvezetőre (e) van rögzítve. A minta által kibocsátott piros fényt ugyanez a lencse párhuzamosítja, majd a dikroikus tükrön való áthaladás után egy másik konvex lencse (f) egy sávszűrőn (g) keresztül a detektorra (h) fókuszálja.

A 6. ábrán látható mérési elrendezésben a minta egy koplanáris hullámvezetőre van rögzítve, melyen keresztül a mikrohullámú generátor (HP 83751A Synthesized Sweeper) be tudja sugározni. Az optikai gerjesztést biztosító zöld ($\lambda = 532$ nm) lézer fényét egy dikroikus tükör (Thorlabs DMLP638) irányítja a minta és a detektor által meghatározott optikai tengellyel párhuzamosan és egy lencse (Thorlabs AC254-30-B) fókuszálja a mintára. A minta által kibocsátott fotolumineszcens fényt az előbb említett lencse párhuzamos nyalábként továbbítja a dikroikus tükrön keresztül egy második gyűjtőlencsére (Thorlabs AC254-100-B), ami fókuszálja a fényt a fotodetektorra. A dikroikus tükör egy hullámhosszfüggő nyalábosztóként viselkedik: a zöld tartományban közel 100%-os reflexió a vörös tartományban nulla közelébe csökken és így a minta által kibocsátott fluoreszcens fény minimális gyengítéssel keresztülhalad rajta. A detektor előtt egy sávszűrő helyezkedik el (Thorlabs FLH635-10). A szűrő 635 nm hullámhosszon 95% feletti transzmisszióval rendelkezik, ami egy 10 nanométeres tartományon kívül erősen levág és már

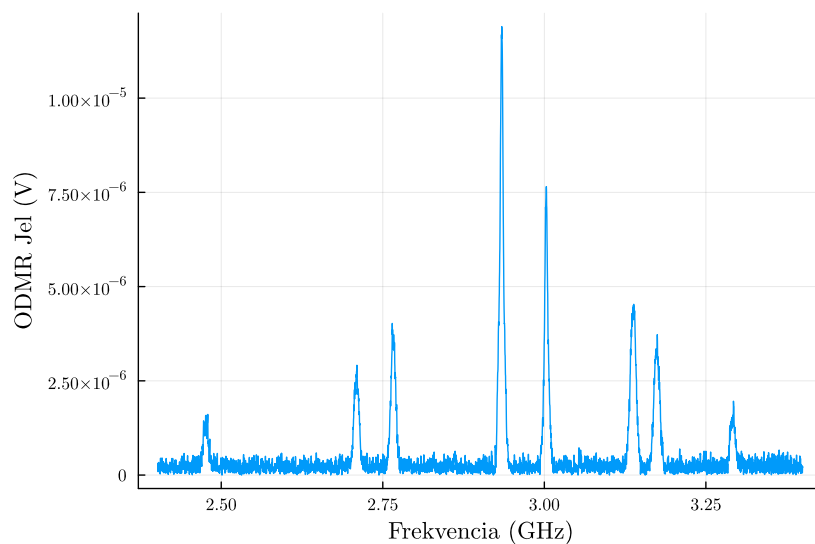
30 nanométerre a központi hullámhossztól OD6-os szűrést ad, ami azt jelenti, hogy csupán minden egymilliomodik foton jut át rajta. Ezáltal az NV centrumok fluoreszcenciájának jelentős része eléri a detektort, ugyanakkor a lézer fényét és a labor világításából beszűrődő fényt blokkolja a szűrő.

A 6. ábrán látható részek (a lézer kivételével) egy optikai sínre vannak rögzítve, a minta pedig egy vasmagos elektromágnes két pofája (pólusa) között helyezkedik el. A minta mellé, a mágnespofákkal párhuzamos síkban egy 49E lineáris Hall-effektus szenzort is elhelyeztünk, melynek feszültségét egy mikrokontroller (Raspberry Pi Pico, 12 bites SAR ADC) mérte meg 1000 mintavételezéssel, kiszámítva a feszültségek átlagát és szórását. Ez kezdetben szerepet játszott a szimulációk illesztésében, viszont az algoritmus végső verziója teljesen önállóan működik, a szenzorra csak az eredmények ellenőrzésének céljából van szükség.

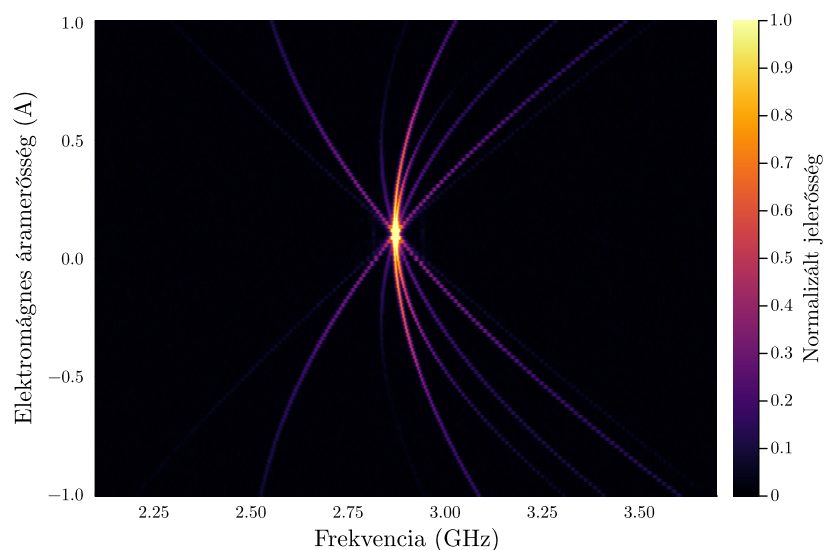
3.2. A mérés folyamata

A lézert 400 mW kimenő teljesítményre állítjuk. A fotodetektort egy lock-in erősítő (Stanford Research SR830) bemenetére kötjük, melynek belső oszcillátorával moduláljuk a mikrohullámú forrást (HP 83751A Synthesized Sweeper). A lock-in erősítő egy kísérletekben sokoldalúan használt hangolható sávszűrőjű feszültségerősítő, ami képes egy ismert frekvenciájú kis amplitúdójú jelet kiemelni a zajból. Ebben a mérésben a mikrohullámú forrást a lock-in erősítő oszcillátora modulálja és az optikai detektor jelében egy ezzel a modulációval fázisban lévő váltakozó komponenst keresünk, míg a többi frekvenciát erősen szűrjük. Az adatok rögzítéséhez a lock-in erősítő periodikus mintavételező funkcióját használjuk, melyet a frekvencia pásztázással együtt indítunk el. A hullámforrás maximum 100 másodperc alatt megy végig a meghatározott frekvenciatartományon, így nagy felbontású spektrumok méréséhez a teljes frekvenciatartományt feldaraboljuk több pásztázásra, majd az adatokat utólag összeillesztjük. Egy ilyen spektrum látható a 7. ábrán. Az egyes spektrumok összefűzhetősége érdekében, valamint a pásztázás indításakor esetlegesen fellépő tranziens feszültség kiküszöbölésére a spektrumok átfedéssel készülnek és első 2-3 adatpontot nem menti el a mérésvezérlő.

A mérésvezérlő program az elektromágnes tápegységét is tudja szabályozni, lehetővé téve hőtérképek felvételét (8. ábra), melyek alapjául szolgáltak az illesztő program korábbi verzióinak. Bár ezen funkció nem szükséges a végleges szimuláció működéséhez, felettébb hasznosnak bizonyult a jelenség megértéséhez és a szimuláció kimeneteinek ellenőrzéséhez.



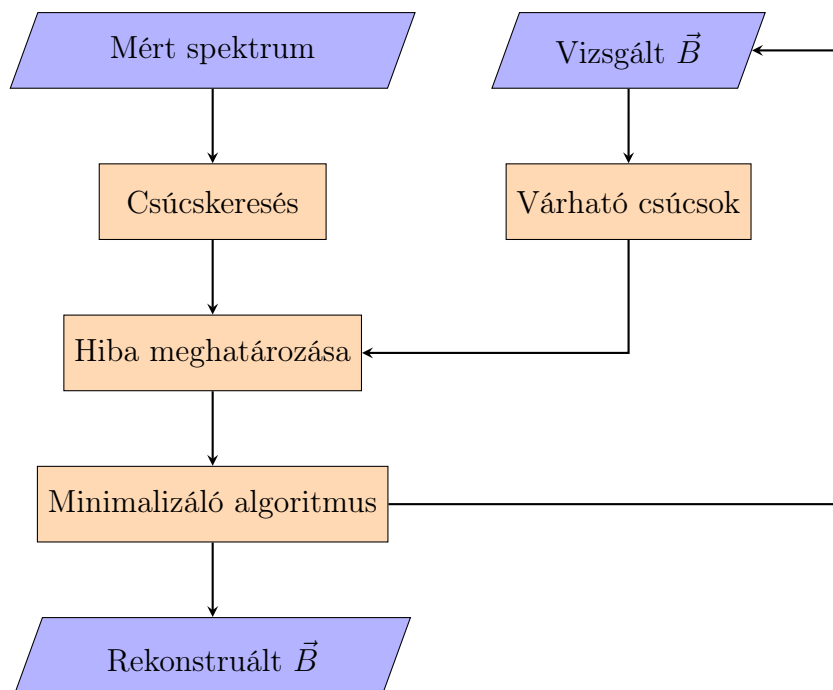
7. ábra. Hat mérésből összeillesztett spektrum. Az ODMR jel alatt a lock-in erősítő által mért feszültség értendő. A szakaszok számának növelésével - növekvő mérési idő mellett - a frekvenciafelbontás tetszőlegesen növelhető a mikrohullámú forrás pontosságáig.



8. ábra. ODMR intenzitás hőterkép a mikrohullámú frekvencia és az elektromágnesen átfolyó áram (és a vele arányos mágneses tér) függvényében.

4. Szimuláció

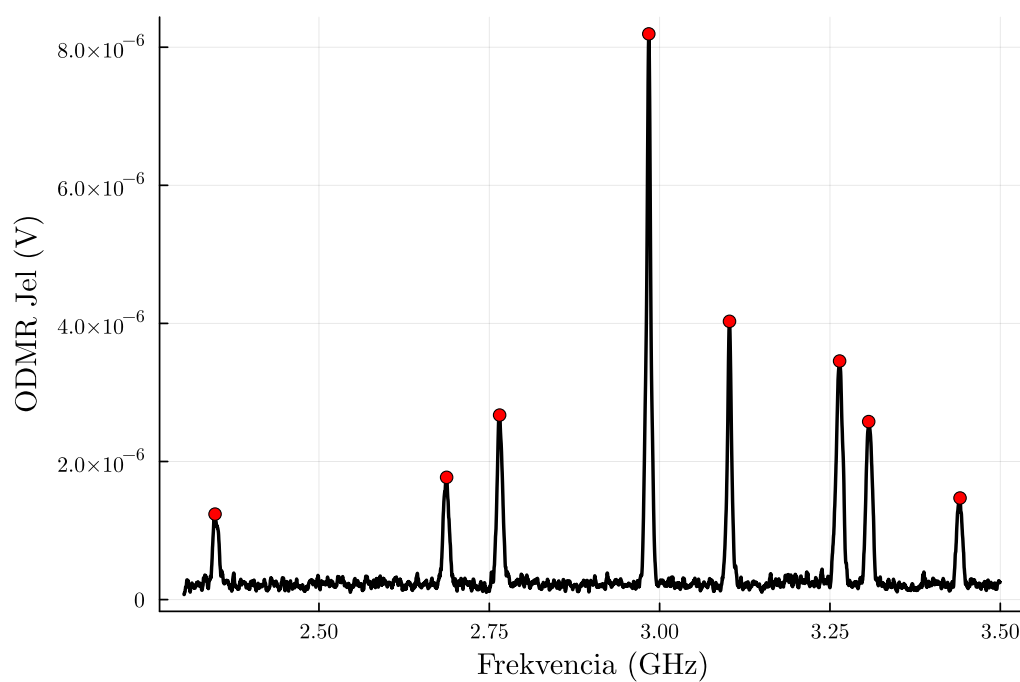
Az általam kidolgozott algoritmus egy adott indukcióvektorhoz tartozó várható rezonáns frekvenciák kiszámolásán alapszik, melyeket összehasonlít a mért csúcsok helyeivel. Ezen hiba minimalizálása a cél.



9. ábra. Az algoritmus felépítése és alapvető részei.

4.1. Csúcsok meghatározása

A mágneses tér meghatározásához mindenképp szükségünk van a rezonáns frekvenciákra. A mért spektrumon futtatunk egy csúskereső algoritmust (Peaks.jl), majd kiválasztjuk a 8 legnagyobb relatív magassággal rendelkező csúcsot. Abban az esetben, ha az adatsor zajos és a program rossz helyen talál csúcsokat, az adatok mozgóátlaggal való elsimítása hatásosnak bizonyult. A 10. ábrán látható egy 5 elemre kiterjedő átlaggal feldolgozott spektrum, melyen a nyolc legnagyobb csúcs van bejelölve.



10. ábra. Csúcsok a mért ODMR spektrumon. A mintát úgy forgattuk, hogy az a mágnespofák által kijelölt tengelyhez képest lehetőleg véletlenszerű szöget zárjon be, így a spektrumunk nyolc vonalból áll.

4.2. Várható rezonanciák

A kristályon belül az NV centrumok lehetséges irányai a következők:

$$\begin{aligned} \vec{NV}_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \vec{NV}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} \\ \vec{NV}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \vec{NV}_4 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

A számítások megkönnyítésének érdekében az a célszerű, ha a koordináta-rendszerünk alapjául a mágneses teret vesszük, mely a z -tengellyel párhuzamos, pozitív irányba mutat és B magnitúdójú. A szimuláció első lépése tehát, hogy rendszerünket úgy transzformáljuk, hogy az ellenőrizendő $\vec{B}$ indukcióvektor a z -tengelyre essen.

A következő lépés az elforgatott NV centrum Hamilton-operátorának kiszámítása (1). Mivel a nulltér-felhasadást leíró operátorok nem függnek a mágneses tértől, ezeket elég egyszer kiszámolni. A Zeeman-felhasadás operátora függ a mágneses tér erősségétől és irányától is, ezért azt minden $\vec{B}$ -hez újra ki kell számolni. A mágneses térrel párhuzamos $\vec{u}$ egységvektor helyére beírhatjuk az elforgatott NV centrum irányvektorát, ezzel lényegében megcserélve a mágneses indukcióvektor és az NV centrum irányát. Ez egyszerűbbé teszi a számítást miközben az eredményt nem befolyásolja.

A Hamilton-operátor sajátértékeinek kiszámolásával megkapjuk az NV centrum alapállapotának energiaszintjeit. Nem-triviális orientációk esetén a legkisebb sajátérték (s_1) az $m_S = 0$ állapotnak, a másik kettő (s_2 és s_3) pedig az $m_S = \pm 1$ állapotoknak felel meg. Az általunk mért átmenetek energiái tehát $|s_1 - s_2|$ és $|s_1 - s_3|$.

Ezen számításokat mind a 4 NV orientációra megismételve megkapjuk a 8 rezonáns frekvenciát.

4.3. Illesztési hiba

Az illesztési hiba kiszámolásához növekvő sorba rendezzük mind a mért rezonáns frekvenciákat, mind pedig a vizsgált indukcióvektorhoz tartozó várható csúcsok helyeit. A két adatsor megfelelő elemeinek különbségét kiszámoljuk, ezek négyzetösszege adja az illesztési hibát.

Az algoritmus akkor működik a legjobban, ha a mért spektrumban mind a 8 csúcs tisztán elkülöníthető, de degenerált orientációkban, valamint a mérhető frekvenciatartományon kívül eső csúcsok esetén is adhat eredményt. Ilyen esetben szükséges először meghatározni, hogy melyik csúcs degenerált, valamint hogy hány rezonáns frekvencia esik a mért tartomány alá és fölé. Ha például tudjuk, hogy az egyik csúcs a méréshatár alatt van, akkor az algoritmus figyelmen kívül hagyhatja a várható csúcsok közül a legkisebbet és a hét fennmaradó csúccsal dolgozhat tovább.

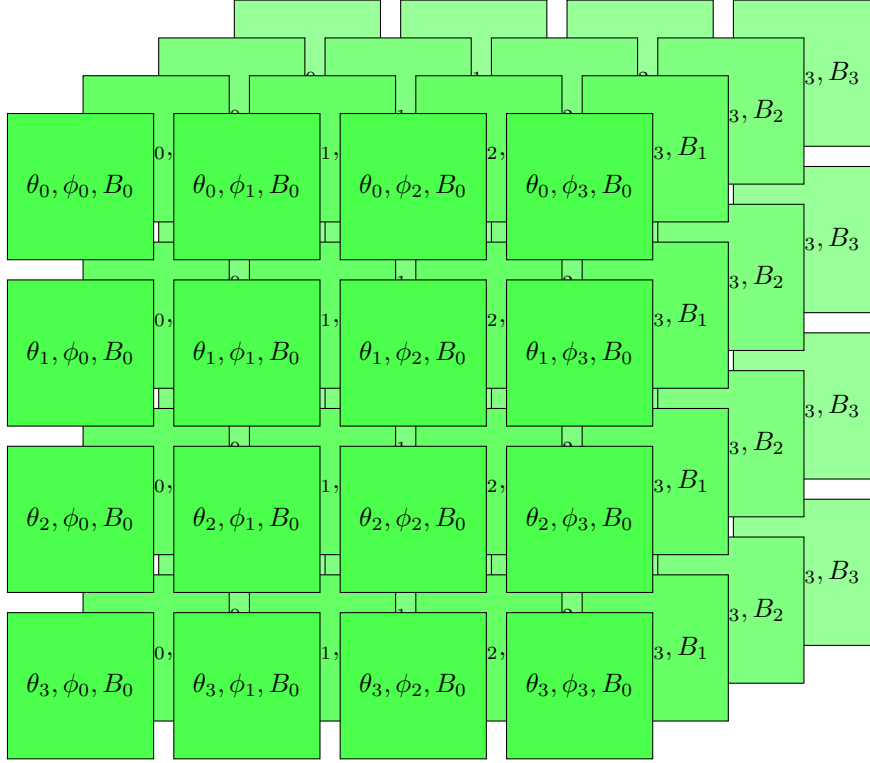
4.4. *Brute force* minimalizálási módszer

Ezen minimalizálási módszernek a lényege az, hogy a vizsgált tartományból diszkrét indukcióvektorokat választunk, ezekre mind kiszámoljuk az illesztési hibát, majd kiválasztjuk a legkisebb hibához tartozó indukciót. Ez a megközelítés nagyon időigényes, viszont kisebb eséllyel esik „csapdába” mint más módszerek és jobb betekintést nyújt a hiba $\vec{B}$ -től való függésébe.

A különböző paraméterű szimulációk nem függnek egymástól, ezért könnyen párhuzamosíthatók. Esetünkben az algoritmus grafikai processzoron (GPU) is futtatható, mely nagyobb teljesítmény elérését teszi lehetővé. Mint azt nevük is sugallja, ezen eszközök elsődlegesen grafikai számítások elvégzésére vannak tervezve, ám képesek tetszőleges lebegőpontos számítások végrehajtására is. Képességeikben limitáltak egy hagyományos CPU-hoz képest (ez többnyire a támogatott adattípusokban nyilvánul meg), viszont akár több ezer maggal rendelkeznek, melynek köszönhetően egy-két nagyságrenddel gyorsabbak bizonyos feladatok elvégzésében.

Az algoritmust Julia programnyelvben [32] implementáltam, a GPU párhuzamosítást a CUDA.jl könyvtár [33, 34] segítségével végeztem el. Az architektúra sematikus rajza a 11. ábrán látható. A program a gömbkoordinátákban megadott bemeneti paramétereket (orientáció és térerősség) három vektorban kapja meg, majd kiszámítja az illesztési hibát minden lehetséges kombinációra.

Összehasonlítás céljából elkészült egy CPU-n futó párhuzamos megvalósítás is. Az algoritmus különböző verzióinak futási idejét egy AMD Ryzen 7900

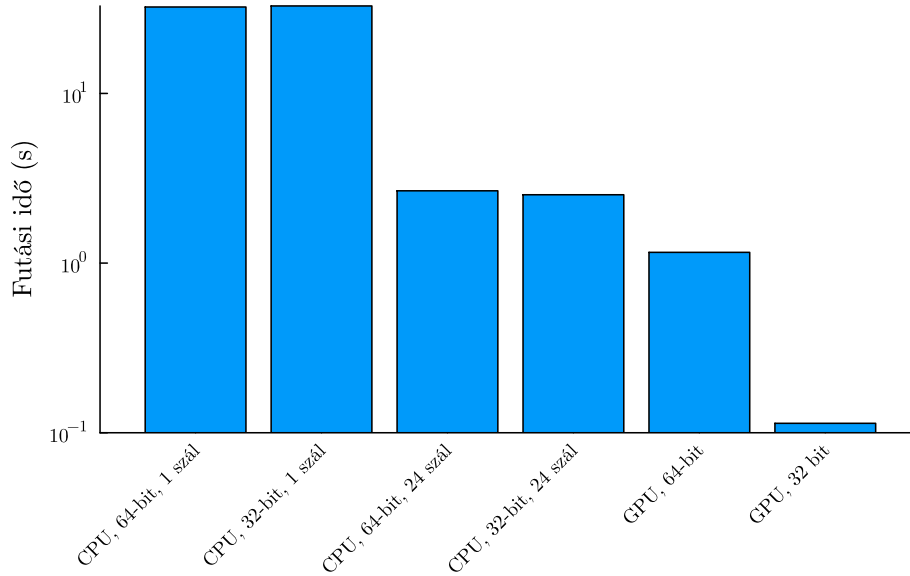


11. ábra. Párhuzamosított GPU architektúra. A vizsgált bemeneti paraméterek lehetséges kombinációin a GPU elvégzi a szimulációt és az illesztési hibákat egy $n_1 \times n_2 \times n_3$ méretű tenzorban adja vissza.

processzorral és Nvidia GeForce RTX 4060 Ti GPU-val ellátott rendszeren mértem meg, 100 (egy szálon futó program esetén 10) mintavétellel, az alábbi paraméterekkel:

- $\theta \in [0; \frac{\pi}{2}]$, 512 minta
- $\phi \in [0; \frac{\pi}{2}]$, 512 minta
- $B \in [0; B_{max}]$, 512 minta, B_{max} véletlenül választva a $[1; 50]$ mT intervallumból

Az összehasonlítás eredményeiből (12. ábra) tisztán látszik, hogy a GPU használata számottevően felgyorsítja a szimulációt, főképp abban az esetben, amikor az alacsonyabb precizitású 32 bites lebegőpontos számok használata elégséges. A CPU nem mutat különösebb preferenciát az alacsonyabb precizitású számítások iránt, így amennyiben azon futtatjuk az algoritmust, célszerű a pontosabb 64 bites lebegőpontos számok használata.



12. ábra. Az algoritmus futási ideje CPU-n és GPU-n változó precíziójú lebegőpontos számokkal, logaritmikus skálán.

4.5. Gradiens minimalizálási módszer

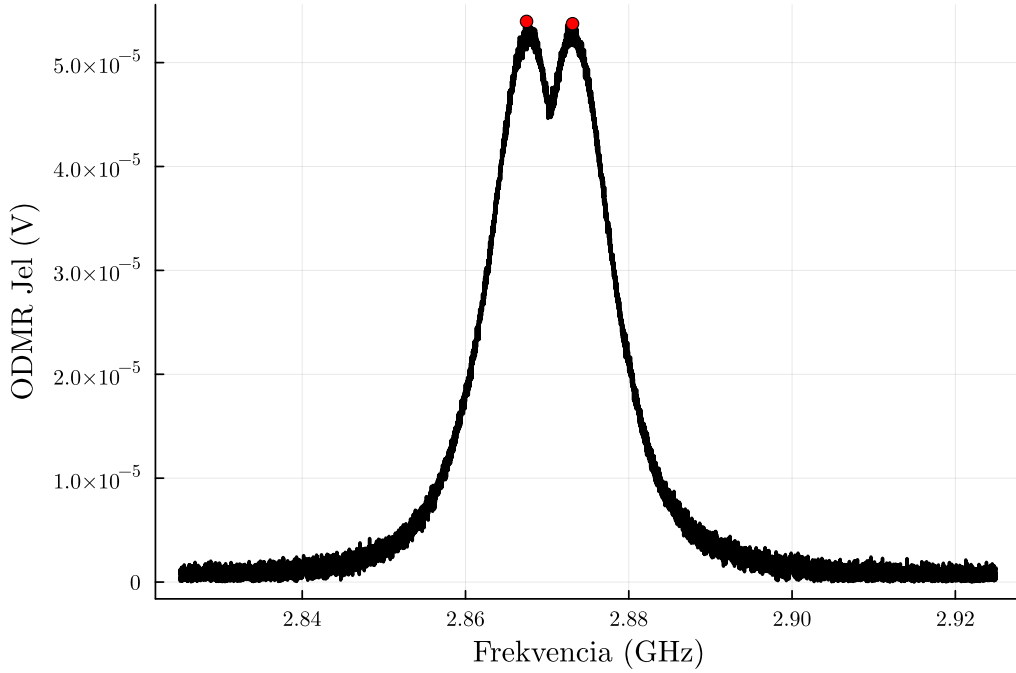
A hiba minimalizálásának egy másik módja az, hogy definiálunk egy $\varepsilon(\vec{B})$ függvényt, mely minden mágneses indukcióvektorhoz hozzá rendel egy illesztési hibát, ezzel magába foglalva a várható csúcsok megkeresését és azok mért értékekkel való összehasonítását. Ezen függvény gradiensét numerikusan meg tudjuk határozni, segítségével pedig új közelítést kapunk $\vec{B}$ -re. A következő lépést a $\vec{B}_{n+1} = \vec{B}_n - c \nabla \varepsilon(\vec{B}_n)$ kifejezéssel kapjuk meg, ahol c egy megfelelően választott pozitív valós konstans.

Ezen módszer nem igényel grafikai processzort és lényegesen gyorsabb az előbbieken leírt *brute force* megoldásnál. A vizsgált esetben a *brute force* módszer 77,9 s alatt 508 kHz átlagos hibával talált megoldást, míg az iteratív algoritmus 83,6 ms alatt csökkentette a hibát 504 kHz-re.

Ez a megközelítés helytelen eredményt adhat, ha egy lokális minimumba ütközik mielőtt megtalálná a globális minimumot. Az általunk mért adatok esetén ez nem okozott problémát, viszont szükség esetén indítható több keresés is különböző kezdőpontokkal, akár párhuzamosan is.

4.6. Kalibráció

Az axiális (D) és rombikus (E) nulltér-felhasadás paraméterek minta- és környezetfüggőek, ezért a szimuláció pontosságának növelése érdekében irodalmi értékek felhasználása helyett saját mérésekből állapítottuk meg őket. A kalibrációhoz az eszközt eltávolítottuk az elektromágnesből és egy elhanyagolható mágneses térben mértük meg a spektrumot 5,2 kHz felbontással. A 13. ábrán látható egy felhasadás nulla mágneses térben is, mely megmagyarázható a kristályon belül elszórtan található töltések elektromos terével [35] és a kristályban jelen lévő feszültséggel. A csúcsok átlaga és különbsége megadja a nulltér-felhasadást leíró két paraméter nagyságát. Előbbi a D paraméterrel, utóbbi pedig az E paraméter kétszeresével egyezik meg.



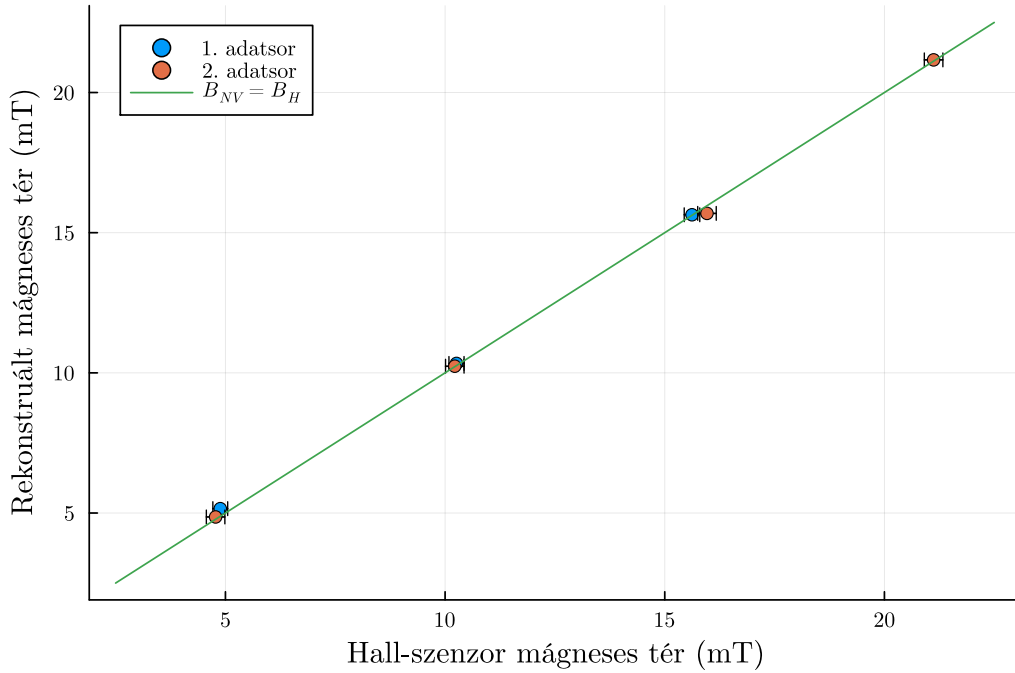
13. ábra. ODMR spektrum nulla mágneses térben. Külső mágneses tér nélkül a négy lehetséges orientációhoz tartozó rezonanciák egybe esnek és az $m_S = \pm 1$ állapotokat csak az E paraméter hasítja fel. Így a két megfigyelt csúcs átlagából a D paramétert, különbségéből pedig az E paraméter kétszeresét kapjuk meg.

A csúcskereső algoritmus használatával $f_1 = 2867,475$ MHz illetve $f_2 = 2873,105$ MHz frekvenciáknál találtunk lokális maximumot, ebből adódóan a szimuláció D paraméterét 2870,290 MHz-ben, E paraméterét pedig 2,815 MHz-ben állapítottuk meg.

A vizsgált esetben az irodalomban gyakran használt $D = 2875$ MHz és $E = 0$ MHz paraméterek mellett az illesztési hiba $116,947 \text{ MHz}^2$ volt, ami átlagos 3823 kHz -es eltérést jelent csúcsonként. A kalibrált konstansokkal ($D = 2870,290 \text{ MHz}$, $E = 2,815 \text{ MHz}$) ezt a hibát sikerült $0,776395 \text{ MHz}^2$ -re csökkenteni, ami megközelítőleg 312 kHz -es csúcsonkénti eltérésnek felel meg. A felhasznált kísérleti adatok frekvenciafelbontása 250 kHz volt, így az illesztés hibája elfogadható tartományba esik.

5. Eredmények

Az algoritmus tesztelésének érdekében különböző mágneses terekben, a minta két eltérő orientációjával vettem fel ODMR spektrumokat, majd összehasonlítottam a spektrumokból rekonstruált mágneses teret a kalibrált Hall-szenzor adataival. A spektrumokból nyert mágneses fluxussűrűség értékek jó egyezést mutatnak a Hall-szenzor által mért értékekkel (14. ábra). Mind a hét adatpontot figyelembe véve az átlagos eltérés (RMSE) csupán $153 \pm 72 \mu\text{T}$ (a bizonytalanság a Hall-szenzor feszültségének méréséből ered, mind kalibráció, mind használat alatt). Érdekes megjegyezni, hogy a felhasznált Hall-szenzor orientációja nem tökéletesen merőleges a mágneses térre, ami részben megmagyarázhatja a szimulációtól való eltérést. A szenzor továbbá egy másik Hall-szenzor segítségével lett kalibrálva hasonló hibaforrásokkal.



14. ábra. Hall-szenzoros és NV centrumos mérés összehasonlítása. A hét spektrumból rekonstruált mágneses terek, valamint a felvétel alatt rögzített Hall-feszültségekből számolt térerősségek egymás függvényében való ábrázolásán látszik, hogy milyen közel vannak egymáshoz a két módszer eredményei.

Az NV centrumok C_{3v} szimmetriái miatt megegyező spektrumot kapunk, ha a mágneses indukcióvektort az NV centrumok által meghatározott tengelyek körül 120° -al elforgatjuk. Továbbá a rendszer nem érzékeny a mágneses tér inverziójára és az NV centrumok ortogonális síkjain történő tükrözésre sem.

Ebből adódóan az algoritmus kimenete csupán egy lehetséges megoldás, $\vec{B} = [B_x, B_y, B_z]$ kimenet esetén érvényes $\pm B_x$, $\pm B_y$ és $\pm B_z$ minden permutációja is, ezzel 48 érvényes megoldást kapunk, mint az megfigyelhető az illesztési hibák hőterképén (15. ábra).

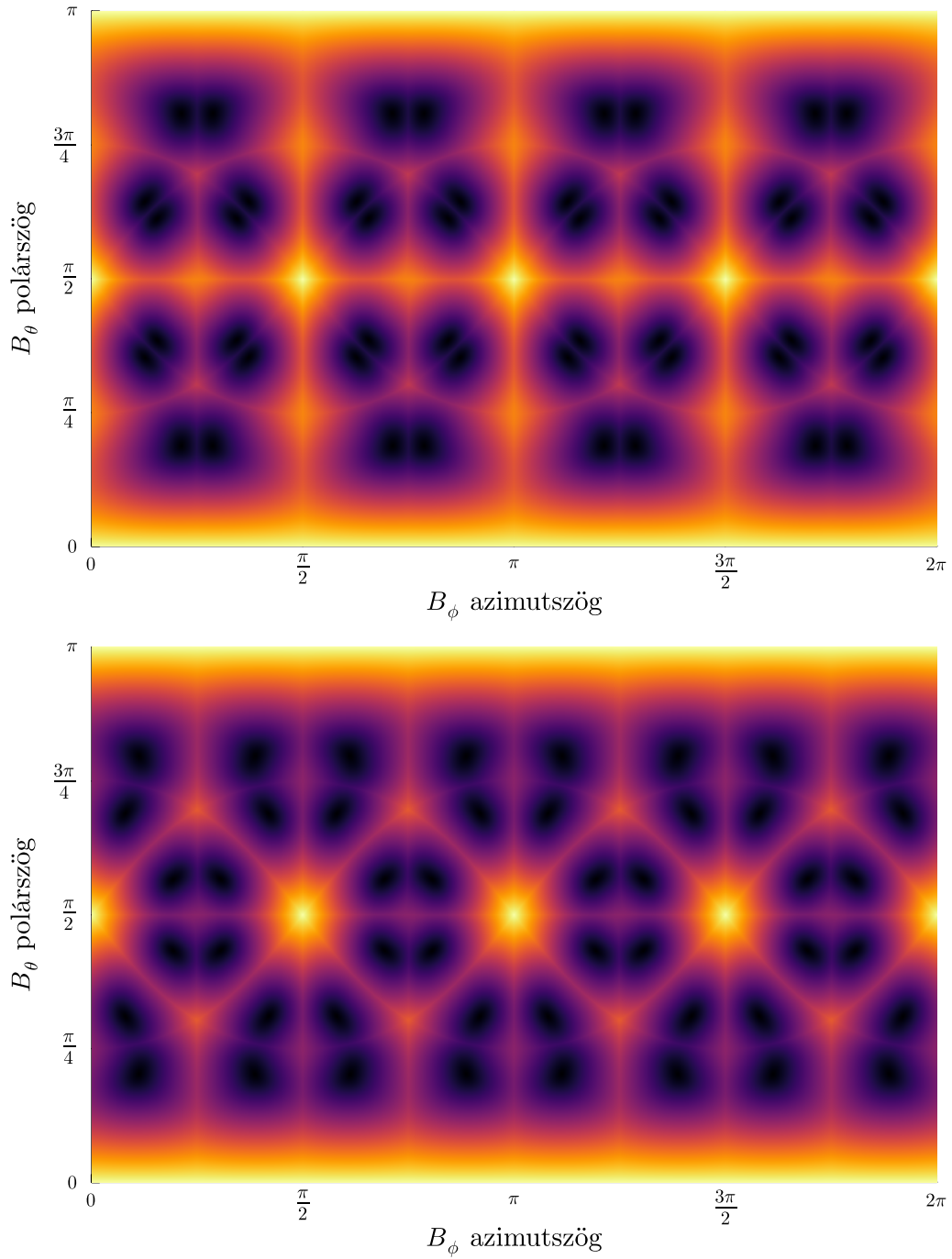
Annak tudatában, hogy a mintát az egyik kristálytani tengelye körül forgatuk el (nevezzük ezt ki az $[1, 1, 1]$ iránynak), ki tudtam választani mindkét megoldáshalmazból a megfelelő vektorokat, melyek a 10 mT körüli térben a következők:

$$\vec{B}_1 = 10,3355 \begin{bmatrix} 0,828665 \\ -0,440783 \\ -0,345000 \end{bmatrix} \text{ mT} \quad (8)$$

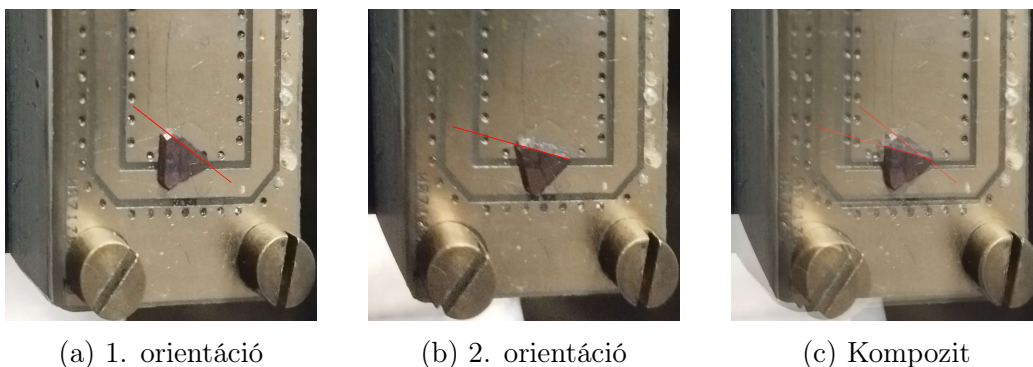
$$\vec{B}_2 = 10,2368 \begin{bmatrix} 0,803962 \\ -0,206103 \\ -0,557823 \end{bmatrix} \text{ mT} \quad (9)$$

Az elforgatás szögét utólag is meghatároztam a mintáról készült fényképek alapján (16. ábra). Az így kapott 22° közel áll a korábban meghatározott vektorok által bezárt $18,28^\circ$ -hoz. A különböző perspektívákból készült képeket kézzel kellett korrigálni (figyelemmel a hullámvezető párhuzamos és merőleges vonalaira), valamint a kristály éléhez szemmértékre illesztettem egyenest, így a szögben várható egy 5° , akár 10° -os bizonytalanság.

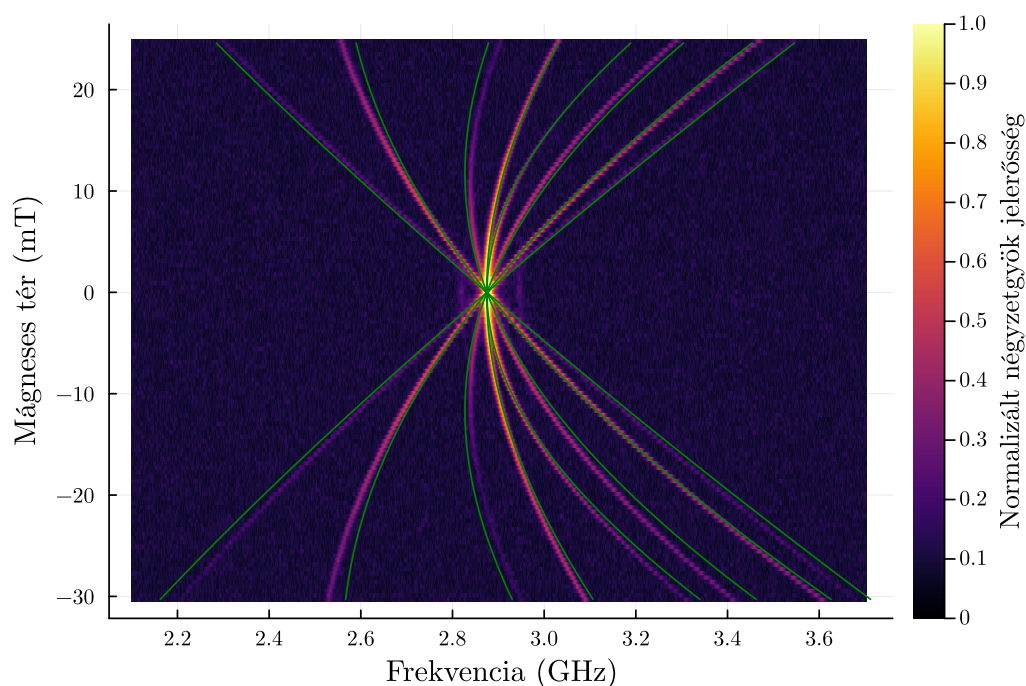
Az illesztés szemléltetése céljából a rekonstruált térből kiindulva elkészítettem egy szimulált hőterképet, mely a mért adatokra helyezve jó egyezést mutat (17. ábra).



15. ábra. Első (felül) és második (alul) adatsor illesztési hibája B orientációjának függvényében konstans erősségű térben (melynek értékét korábbi illesztések adták meg). A sötét foltokban alacsony az illesztés átlagos hibája (RMSE). Látható a 48 lehetséges megoldás helye.



16. ábra. Kép az első (a) és második (b) adatsor felvételéhez használt minta orientációjáról, valamint a két kép kompozitja (c). Az illesztés az eltérő perspektívák miatt pontatlan. A piros vonalak a minta egy éléhez vannak illesztve, megközelítőleg 22° -os szöget zárnak be.



17. ábra. Mért hőterkép, rajta a rezonanciák szimulált helyei (zöld). A felvett hőterkép néhány – tisztán elkülöníthető csúcsokkal rendelkező spektrumot tartalmazó – sorát felhasználva az algoritmussal meghatároztam a minta orientációját, valamint a mágneses tér függését az elektromágnesen átfolyó áramerősségtől. Ezen adatok felhasználásával minden B értékre meghatároztam a rezonanciák várt helyét. Az illesztés legjelentősebb hibaforrása a széles spektrumok alacsony (1,564 MHz-es) frekvenciafelbontásából adódik.

6. Összegzés

Munkámban bemutattam, hogyan lehet nitrogén-vakancia centrumokon elvégzett optikailag detektált mágneses rezonancia spektroszkópiával meghatározni ismeretlen nagyságú és irányú mágneses tereket, pontosabban a mágneses fluxussűrűséget, indukciót. A mágneses tér okozta Zeeman-felhasadás következtében nyolc rezonáns vonalat figyeltem meg egy véletlenszerűen orientált gyémánt egykristályban található NV centrum sokaságon elvégzett ODMR mérésben. A nyolc vonal a megfigyelt térfogatban lévő NV centrumok 4 lehetséges orientációjából illetve irányonként 2-2 lehetséges mikrohullámú átmenetéből adódik. Külső mágneses tér nélkül felvett ODMR spektrumból a mintára jellemző zérustér paramétereket meghatározhattam, így a véges mágneses térben elvégzett méréseknél ezeket már ismertnek tekintettem. Ezáltal az egy spektrumból kiolvasott rezonanciafrekvenciák a mágneses tér nagyságáról és irányáról is információt adtak.

Ezt követően az elektromágnes tápegységének áramát változtatva ODMR térképeket vettem fel, ahol a rezonanciafrekvenciák fejlődése látszik a mágneses térben. Általában az ilyen elektromágneseket egy a mágnespofák közé elhelyezett Hall-szenzorral kalibrálják. Ezt én is megtettem, ugyanakkor az NV centrumok alkalmazásának előnye, hogy nincs szükség erre a kalibrációra, a nulla térben mért spektrum felhasználásával az NV centrumok pontos mágneses tér mérést tettek lehetővé. Ez azért előnyös, mert a Hall-szenzorral könnyen igazolhatunk egy ilyen összefüggést, ugyanakkor ahhoz hogy a szenzor pontosan a minta helyén lévő tér értékét adja vissza rendkívül precíz beállítások szükségesek.

Az NV centrumokon alapuló módszer megbízhatóságának igazolására, a mintát elforgattam majd a méréseket megismételtem. A forgatás mértékét a mintáról készített felvételekről határoztam meg és ez jó egyezést mutatott a szimulációkból kapott különbséggel.

A szimulációk elvégzésére kidolgoztam egy horizontálisan skálázható grafikai processzoron futó algoritmust, amely betekintést nyújtott a rendszer viselkedésébe. A tér gyors rekonstrukciója érdekében egy alternatív módszert is kifejlesztettem, mely kevesebb, mint 100 ms alatt ad megoldást. Ez lehetővé teszi a szenzor szélesebb körű felhasználását, mivel az adatok feldolgozására elég egy alacsonyabb teljesítményű processzor.

A mérési módszer jövőbeli fejlesztésére a legnagyobb lehetőséget az orientáció egyértelmű rekonstrukciójában látom. A mért tér egy nagyobb, külső mágneses (ún. *bias*) térrel való eltolása segíthet ebben, ám ez nagy tereknél nem praktikus. Egy másik megközelítés az adott nitrogén-vakancia centrum

irányok szelekciója az optikai, valamint a mikrohullámú gerjesztés polarizációjával. A beeső fény polarizációja és az NV centrum által bezárt szög egyértelműen meghatározza a gerjesztési rátát [36]. Cirkulárisan polarizált mikrohullámokkal pedig szelektíven gerjeszthető a $m_S = \pm 1$ állapotokba való átmenet [36]. Ez lehetővé teszi, hogy a rezonanciákat különböző orientációkhoz rendeljük és egyértelműen rekonstruáljuk a mágneses teret [37].

7. Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni témavezetőmnek, Kollarics Sándornak, hogy lehetővé tette a kutatómunkámat és ennek a dolgozatnak a létrejöttét. Továbbá köszönettel tartozom középiskolai fizikatanáromnak, Müllerné Ódor Marianának, aki ezen az úton elindított.

A dolgozat elkészítését a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) és a Kulturális és Innovációs Minisztérium (KIM) támogatta a K137852, 2022-2.1.1-NL2022-00004, 2019-2.1.7-ERA-NET-2021-00028 (V4-Japán, BGapEng), TKP2021-NVA02 és TKP2021-EGA-02 számú pályázatok révén.

Hivatkozások

- [1] Á. Gali. „Kvantumtechnológiai rendszerek: szimuláció és kísérleti megvalósítás”. *Fizikai Szemle* **749** (2017), 157–162. old.
- [2] A. Gruber és tsai. „Scanning Confocal Optical Microscopy and Magnetic Resonance on Single Defect Centers”. *Science* **276**.5321 (1997), 2012–2014. old. URL: <https://doi.org/10.1126/science.276.5321.2012>.
- [3] John F. Barry és tsai. „Sensitivity optimization for NV-diamond magnetometry”. *Rev. Mod. Phys.* **92** (1 2020), 15004. old. DOI: 10.1103/RevModPhys.92.015004. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.92.015004>.
- [4] Michael N. R. Ashfold és tsai. „Nitrogen in Diamond”. *Chem. Rev.* **120**.12 (2020), 5745–5794. old. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00518>.
- [5] Francis P Bundy. „The P, T phase and reaction diagram for elemental carbon, 1979”. *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **85**.B12 (1980), 6930–6936. old. URL: <https://doi.org/10.1029/JB085iB12p06930>.
- [6] John C Angus, Herbert A Will és Wayne S Stanko. „Growth of diamond seed crystals by vapor deposition”. *J. Appl. Phys.* **39**.6 (1968), 2915–2922. old. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1656693>.
- [7] Mutsukazu Kamo és tsai. „Diamond synthesis from gas phase in microwave plasma”. *J. Cryst. Growth* **62**.3 (1983), 642–644. old. URL: [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(83\)90411-6](https://doi.org/10.1016/0022-0248(83)90411-6).
- [8] Paul W May. „Diamond thin films: a 21st-century material”. *Philos. Trans. R. Soc., A* **358**.1766 (2000), 473–495. old. URL: <https://doi.org/10.1098/rsta.2000.0542>.
- [9] JJ Gracio, QH Fan és JC Madaleno. „Diamond growth by chemical vapour deposition”. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**.37 (2010), 374017. old. URL: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/43/37/374017>.
- [10] Michael Schwander és Knut Partes. „A review of diamond synthesis by CVD processes”. *Diamond Relat. Mater.* **20**.9 (2011), 1287–1301. old. URL: <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2011.08.005>.
- [11] John C Angus. „Diamond synthesis by chemical vapor deposition: The early years”. *Diamond Relat. Mater.* **49** (2014), 77–86. old. URL: <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2014.08.004>.
- [12] Seiichiro Matsumoto és tsai. „Growth of diamond particles from methane-hydrogen gas”. *J. Mater. Sci.* **17**.11 (1982), 3106–3112. old. ISSN: 1573-4803. DOI: 10.1007/BF01203472. URL: <https://doi.org/10.1007/BF01203472>.

- [13] R Haubner és B Lux. „Diamond growth by hot-filament chemical vapor deposition: state of the art”. *Diamond Relat. Mater.* **2.9** (1993), 1277–1294. old. URL: [https://doi.org/10.1016/0925-9635\(93\)90008-P](https://doi.org/10.1016/0925-9635(93)90008-P).
- [14] Kazuhiro Suzuki és tsai. „Growth of diamond thin films by dc plasma chemical vapor deposition”. *Appl. Phys. Lett.* **50.12** (1987), 728–729. old. URL: <https://doi.org/10.1063/1.98080>.
- [15] Naoto Ohtake és Masanori Yoshikawa. „Diamond film preparation by arc discharge plasma jet chemical vapor deposition in the methane atmosphere”. *J. Electrochem. Soc.* **137.2** (1990), 717. old. URL: <https://doi.org/10.1149/1.2086540>.
- [16] H Berthou és tsai. „Morphology and Raman spectra of diamond films grown with a plasma torch”. *Diamond Relat. Mater.* **8.2-5** (1999), 636–639. old. URL: [https://doi.org/10.1016/S0925-9635\(98\)00332-X](https://doi.org/10.1016/S0925-9635(98)00332-X).
- [17] Mutsukazu Kamo és tsai. „Diamond synthesis from gas phase in microwave plasma”. *J. Cryst. Growth* **62.3** (1983), 642–644. old. URL: [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(83\)90411-6](https://doi.org/10.1016/0022-0248(83)90411-6).
- [18] A. Gali. „Ab initio theory of the nitrogen-vacancy center in diamond”. *Nanophotonics* **8.11** (2019), 1907–1943. old. URL: <https://doi.org/10.1515/nanoph-2019-0154>.
- [19] A. M. Edmonds és tsai. „Production of oriented nitrogen-vacancy color centers in synthetic diamond”. *Phys. Rev. B* **86** (3 2012. júl.), 35201. old. DOI: 10.1103/PhysRevB.86.035201. URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.035201>.
- [20] Takahiro Fukui és tsai. „Perfect selective alignment of nitrogen-vacancy centers in diamond”. *Appl. Phys. Express* **7.5** (2014. ápr.), 55201. old. URL: <https://doi.org/10.7567/APEX.7.055201>.
- [21] Julia Michl és tsai. „Perfect alignment and preferential orientation of nitrogen-vacancy centers during chemical vapor deposition diamond growth on (111) surfaces”. *Appl. Phys. Lett.* **104.10** (2014), 102407. old. DOI: 10.1063/1.4868128. URL: <https://doi.org/10.1063/1.4868128>.
- [22] Hayato Ozawa és tsai. „Formation of perfectly aligned high-density NV centers in (111) CVD-grown diamonds for magnetic field imaging of magnetic particles”. *Jpn. J. Appl. Phys.* **58.SI** (2019. júl.), SIIB26. DOI: 10.7567/1347-4065/ab203c. URL: <https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab203c>.
- [23] Joseph R Lakowicz. *Principles of fluorescence spectroscopy*. Springer, 2006. URL: <https://doi.org/10.1007/978-0-387-46312-4>.
- [24] Victor Marcel Acosta. „Optical magnetometry with nitrogen-vacancy centers in diamond”. PhD Thesis. University of California, Berkeley, 2011. URL: <https://escholarship.org/content/qt1rj4p2ch/>

qt1rj4p2ch_noSplash_b9ef459a1548b8a5fe45f00736e294a9.pdf?t=mtfdiw.

- [25] GD Fuchs és tsai. „Excited-state spin coherence of a single nitrogen-vacancy centre in diamond”. *Nat. Phys.* **6.9** (2010), 668–672. old. URL: <https://doi.org/10.1038/nphys1716>.
- [26] P Neumann és tsai. „Quantum register based on coupled electron spins in a room-temperature solid”. *Nature Physics* **6.4** (2010), 249–253. old. URL: <https://doi.org/10.1038/nphys1536>.
- [27] Sándor Kollarics. „Magneto-optical spectroscopy on qubit candidate solid state systems”. Dissz. Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 2023.
- [28] S. Kollarics és tsai. „Optical–Microwave Pump–Probe Studies of Electronic Properties in Novel Materials”. *Phys. Status Solidi B* 257.12 (2020), 2000298. old. DOI: 10.1002/pssb.202000298.
- [29] J R Maze és tsai. „Properties of nitrogen-vacancy centers in diamond: the group theoretic approach”. *New J. Phys.* **13.2** (2011. febr.), 25025. old. URL: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/13/2/025025>.
- [30] J. R. Maze és tsai. „Nanoscale magnetic sensing with an individual electronic spin in diamond”. *Nature* **455.7213** (2008), 644–647. old. URL: <https://doi.org/10.1038/nature07279>.
- [31] S. Kollarics és tsai. „Ultrahigh nitrogen-vacancy center concentration in diamond”. *Carbon* 188 (2022), 393–400. old. DOI: 10.1016/j.carbon.2021.12.032.
- [32] Jeff Bezanson és tsai. „Julia: A Fresh Approach to Numerical Computing”. *SIAM Review* 59.1 (2017), 65–98. old. DOI: 10.1137/141000671.
- [33] Tim Besard, Christophe Foket és Bjorn De Sutter. „Effective Extensible Programming: Unleashing Julia on GPUs”. *IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems* (2018). ISSN: 1045-9219. DOI: 10.1109/TPDS.2018.2872064. arXiv: 1712.03112 [cs.PL].
- [34] Tim Besard és tsai. „Rapid software prototyping for heterogeneous and distributed platforms”. *Advances in Engineering Software* 132 (2019), 29–46. old.
- [35] T. Mittiga és tsai. „Imaging the Local Charge Environment of Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond”. *Phys. Rev. Lett.* 121 (24 2018. dec.), 246402. old. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.246402. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.246402>.
- [36] Thiago P Mayer Alegre és tsai. „Polarization-selective excitation of nitrogen vacancy centers in diamond”. *Phys. Rev. B* **76.16** (2007), 165205. old. URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.165205>.
- [37] F. Münzhuber és tsai. „Polarization-Assisted Vector Magnetometry with No Bias Field Using an Ensemble of Nitrogen-Vacancy Centers

in Diamond”. *Phys. Rev. Appl.* 14 (1 2020. júl.), 14055. old. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.14.014055. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.14.014055>.

A. Forráskód

Az algoritmus forráskódja elérhető a github.com/bgoblyos/NVSim git tárolóban (*repository*) néhány felhasznált adathalmazzal együtt. A projekt többnyire Pluto jegyzetfüzetekből áll, melynek futtatásához szükség van egy Julia futtatási környezetre valamint a GPU-gyorsított programok esetén egy olyan grafikai processzorra, mely támogatja a CUDA technológiát.

A mérések vezérlőkódja a github.com/bgoblyos/pymeas-ng tárolóban található.