

Magspin polarizáció maximalizálása a
PulsePol protokoll segítségével
Elméleti tanulmány a gyémántban elhelyezkedő
NV-centurmon

TDK Dolgozat

Írta:

Weismüller Roland

Fizikus MSc. 2. évfolyam

Témavezetők:

Iványi Viktor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék,

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Egyetem tér 1-3, H-1053 Budapest, Magyarország

Oscar Bulancea-Lindvall

Department of Physics, Chemistry and Biology,

Linköping University, SE-581 83 Linköping, Svédország



Eötvös Loránd Tudományegyetem

2025. január 7.

Kivonat

A magspin polarizációs protokollok kulcsfontosságú elemei a modern NMR és MRI méréseknek, valamint a szilárdtest kvantumalkalmazások, például a kvantumérzékelés, kvantumkommunikáció és kvantumszámítás fejlesztésének. Az utóbbi időben a széles tiltott sávú félvezetők az optikailag "címkézhető" elektronspin-qubitek ígéretes alternatívaként jelentek meg a nukleáris polarizáció számára, az elektronspin és a magspin közötti dinamikus spin polarizációs átvitel révén. Egy széles körben használt eljárás a kvantumalkalmazásokban a PulsePol protokoll, amely hatékony és robusztus a gerjesztési hibákkal és a rezonanciától való elhangolódásokkal szemben. Azonban a protokoll pontos numerikus szimulációi és alapos elméleti megértése eddig korlátozott volt a hiperfinom csatolás leírásában használt közelítések és a többspinű korrelációs hatások figyelmen kívül hagyása miatt. A TDK munkámban a pulzált polarizációs protokoll viselkedését vizsgáljuk egy NV centrumon gyémántban, pontos numerikus hiperfinom tenzorokat használva a közeli magspinekre. Bemutatom, hogy a PulsePol protokoll egy módosított pulzusidőzítéssel képes még magasabb polarizációs fokot elérni. Ez az elméleti elemzés segíti a PulsePol protokoll megértését, és felhívja a figyelmet a további fejlesztési lehetőségekre.

Tartalomjegyzék

Bevezetés	3
Elméleti háttér és módszerek	6
NV centrum rövid elméleti áttekintése	6
A PulsePol protokoll	9
Szimulációs módszerek	14
Eredmények	16
Protokoll limitációi	16
Szisztematikus vizsgálat	17
Korrekción meghatározása	25
Összegzés	30
Függelék	32
Saját eredmények	35

Bevezetés

A széles tiltott sávú félvezetőkben található ponthibák kiemelkedő tulajdonságokat mutattak számos alkalmazásban, a kvantuminformációs feldolgozástól [1, 2, 3] a nanoszintű érzékelésig [4, 5, 6]. Ezek közül a nitrogén-vakancia (NV) centrum a gyémántban különösen ígéretes hibának bizonyult, köszönhetően egyedi kvantumtos tulajdonságainak és sokoldalú alkalmazhatóságának. Ezt a hibát kiterjedten tanulmányozták és használták qubitként [7], kiemelkedő koherenciaideje [8] és az optikai és mikrohullámú manipuláció lehetősége miatt [9, 10, 11].

Az NV-centrum a kvantumszámításon túl is széles körben alkalmazható, többek között mágneses térérzékelésben [12], nanoszintű hőmérsékletmérésben [13] és kvantumkommunikációban [7]. Optikai inicializálási és kiolvasási képessége, hosszú koherenciaideje (T_2), valamint a spinállapot precíz manipulálhatósága miatt az NV-centrumot rendkívül vonzó rendszerré teszi ezekhez a különböző alkalmazásokhoz. Például az NV-centrumok T_2 ideje akár mikroszekundumos nagyságrendű is lehet szobahőmérsékleten, ami lehetővé tesz hosszabb kvantum-algoritmusok végrehajtását és pontos méréseket. Különösen fontos tulajdonság az NV-centrumok azon képessége, hogy a hiperfinom kölcsönhatás miatt lehetővé teszi a közeli atommagspinek polarizációját és ezen spinek precíz manipulációját. Ezért a hiperfinom csatolás megértése elengedhetetlen, különösen az olyan protokolloknál, mint a dinamikus nukleáris polarizáció (DNP) és a kvantummemóriaként való alkalmazásokhoz. Ezek a hiperfinoman-csatolt nukleáris regiszterek nemcsak a koherenciaidőket hosszabbítják meg, hanem növelik az NV-centrum képességét a kvantuminformációs feldolgozásra, amint azt a legújabb kutatások is kiemelik [8] [14].

Az NV-centrum fontos szerepet játszik a hiperpolarizáció létrejöttében, amely létfontosságú a magmágneses rezonancia (NMR) és egyéb spektroszkópai technikák érzékenységeinek növelésében. A hiperpolarizáció a nukleáris spinek orientációját jelenti, amely növeli a jel-zaj arányt az NMR-mérésekben. Ez különösen hasznos gyenge jelek észleléséhez és molekuláris struktúrák felbontásának a javításához. Az NV-centrum központi szerepet játszik ebben a folyamatban, DNP [10] [15] és kereszt-polarizációs [16] technikák alkalmazásával. Ezek a módszerek kihasználják az

NV-centrum nagyfokú spinpolarizációjának átvitelét a közeli nukleáris spinekre, így növelve a polarizált spinek számát a mintában. Korai protokollok, mint például a Hartmann-Hahn keresztpolarizáció, megalapozták ezt, de az NV-centrumokkal elért legújabb fejlesztések jelentősen javították a polarizáció átadásának hatékonyságát. Például olyan protokollokat fejlesztettek ki, amelyek lehetővé teszik a közeli magspinek dinamikus polarizálását nagyobb kontrollal és precizitással. Ez a fejlesztés új lehetőségeket nyitott a molekuláris struktúrák nanométer skálájú, példátlan részletességgel történő tanulmányozására.

A spininterakciók vezérlésére és magas polarizációs szintek elérésére szolgáló robusztus protokollok kifejlesztése kulcsfontosságú cél ezen a területen. Ebben az összefüggésben a protokollok olyan strukturált műveleti vagy impulzus-sorozatokra utalnak, amelyeket a magspinek kontrollált manipulálására terveztek. Ezek közül a PulsePol [17] szekvencia különösen hatékornak bizonyult. A PulsePol egy dinamikus szétválasztási (dynamic decoupling) szekvencia, amelyet kifejezetten a mag- és elektronspin közötti polarizáció átvitelének fokozására terveztek, így hatékony eszközzé vált a spin-interakciók vezérlésében. Alapvetően a PulsePol periodikus mikrohullámú impulzussorozatokot használ, amelyek a polarizáció átvitelét végzik, lehetővé téve a spinállapotok hatékony manipulálását különféle feltételek mellett. Alapvető működési elve a elektron spin rezonancia (ESR) és a magmágneses rezonancia módszereinek megalapozott elveiből ered, ahol impulzussorozatokat alkalmaznak a nem kívánt interakciók elnyomására, miközben a kívánt kapcsolatokat erősítik[18] [19].

A PulsePol szekvencia egy effektív kicserélődési Hamilton-operátorral írható le, amely lineáris a qubit és nukleáris állapot közötti kapcsolatban, alacsony hiperfinom közelítés mellett. Hatékonysága a polarizáció gyors átvitelében, különösen olyan rendszerekben, amelyek nagy atommag-elektron kölcsönhatási-konstansokkal rendelkeznek, jelentősen csökkentheti a kvantumállapotok inicializálásához szükséges időt. Annak ellenére, hogy sikeres polarizációs módszerről beszélünk, észrevehető egy jelentős elméleti hiányosság a levezetésében, amely így valós rendszerek leírására közelítések és elhanyagolások nélkül nem alkalmazható. Így a protokoll pontatlan olyan magspineken való alkalmazására amelyek kölcsönhatási erőssége meghaladja

a néhány kHz-t (közeli magspinek). A jelenleg használt PulsePol protokoll amely a gyenge hiperfinom interakciók feltételezésére épül, korlátokat mutat, amikor erősen csatolt rendszerekre alkalmazzák. Ez a korlátozás befolyásolja a legközelebbi szomszéd atommagokat használó rendszereket, ahol magas polarizációs szintek fenntartása nehezen megoldható. Ez a korlát kiemeli annak szükségességét, hogy további kutatásokat végezzünk a PulsePol protokoll optimalizálására valóságosabb kölcsönhatások figyelembevételével.

Egy nemrégiben megjelent munka [20] jelentős előrelépéseket tett a hiperfinom kölcsönhatások pontos meghatározása felé, amelyek kulcsfontosságúak a spininterakciók atomi szintű megértésében. Erre az alapra építve a TDK munkám célja a valós - teljes hiperfinom tenzorokkal leírt - rendszereken vett gyakorlati vizsgálata a PulsePol szekvenciának. Az szakirodalmi hiányosságok kezelésével célom, hogy megértsem és javítsam a spinpolarizációs PulsePol protokoll hatékonyságát, és tovább bővítssem az NV-centrumok potenciálját a kvantumalkalmazások területén.

Elméleti háttér és módszerek

NV centrum rövid elméleti áttekintése

Az NV-centrum egy nitrogénatomot tartalmaz, amely a gyémántrács egy szénatomját helyettesíti, mely szomszédos egy vakanciával, így létrehozva egy C_{3v} szimmetrikus szerkezetet. A szabad kötésekkel rendelkező atomok lokalizált hibaállapotokat hoznak létre a gyémánt tiltotsávjában, amelyeken keresztül manipulálhatóak a spinállapotok. Az NV^- negatív töltésű állapot triplett ($S = 1$) effektív spinű alapállapotot hoz létre, amely optikai úton manipulálható[15].

Az NV^- elektronállapotok 1.9 eV-nál nagyobb fotonenergiával gerjeszthetők, melynek hatására a triplett 3A alapállapot a triplett 3E gerjesztett állapotba kerül 0.1 3.) ábra.

A relaxációs folyamat során, amely meta-stabil szinglett állapotokon keresztül zajlik, spin-állapot preferencia alakul ki 0.1 2.) ábra. Ez a preferencia azt eredményezi, hogy az NV^- centrum gerjesztett állapotából történő relaxáció során az alapállapotba történő populáció visszatöltése torzítottan megy végbe, azaz nem egyenlően oszlik meg az m_S spin-állapotok között. A folyamatban előnyben részesül az $m_S = 0$ állapot, ami azt jelenti, hogy a relaxáció során ennek az állapotnak a populációja megnövekszik az $m_S = \pm 1$ állapotokhoz képest.

Az optikai pumpálás tehát képes polarizálni a ponthibát a triplett elektronspin $m_S = 0$ állapotába, illetve mérhető különbséget okoz a lumineszcencia intenzitásában, amely felhasználható a spin-állapot kiolvasására.

Az NV^- triplett spinje egy effektív Hamilton operátora

$$\hat{H}_0 = D \left(S_z^2 - \frac{2}{3} \right) + \mu_B g_e \vec{B} \cdot \vec{S}, \quad (0.1)$$

alakban írható ahol az első tag a ponthiba zero-field splitting (ZFS) kölcsönhatását írja le, $D = 2.87$ GHz értékkel. A második tag a Zeeman-hatást mutatja, amely az $m_S \neq 0$ állapotok felhasításáért felelős a külső mágneses tér B_z hatására, és lehetővé

teszi a centrum mikrohullámú gerjesztését $\vec{B}$ transzverzális komponensein keresztül. Az μ_B és g_e mennyiségek rendre a Bohr-mageton és az elektron Landé-g-tényezője ($g_e \approx 2.0$).

Az NV^- elektronállapotokat hatékonyan alkalmazhatjuk qubit-rendszer létrehozására. Egy effektív két-szintű rendszer érhető el megfelelően magas mágneses tér alkalmazásával, amely kellően szétválasztja az $m_S = +1$ állapotot az $m_S = \{0, -1\}$ állapotoktól, hogy ez utóbbiak izoláltnak tekinthetők. A spin-operátorok, $\vec{S}$, ezután spin-duplet operátorokként értelmezhetők, amelyek csak az $m_S = \{0, -1\}$ állapotokra hatnak.

Az NV-centrum közeli magspinekkel is kölcsönhatásba lép, amely interakciók, a pszeudo-szekuláris közelítésben, az alábbi Hamilton-operátorral írhatók le:

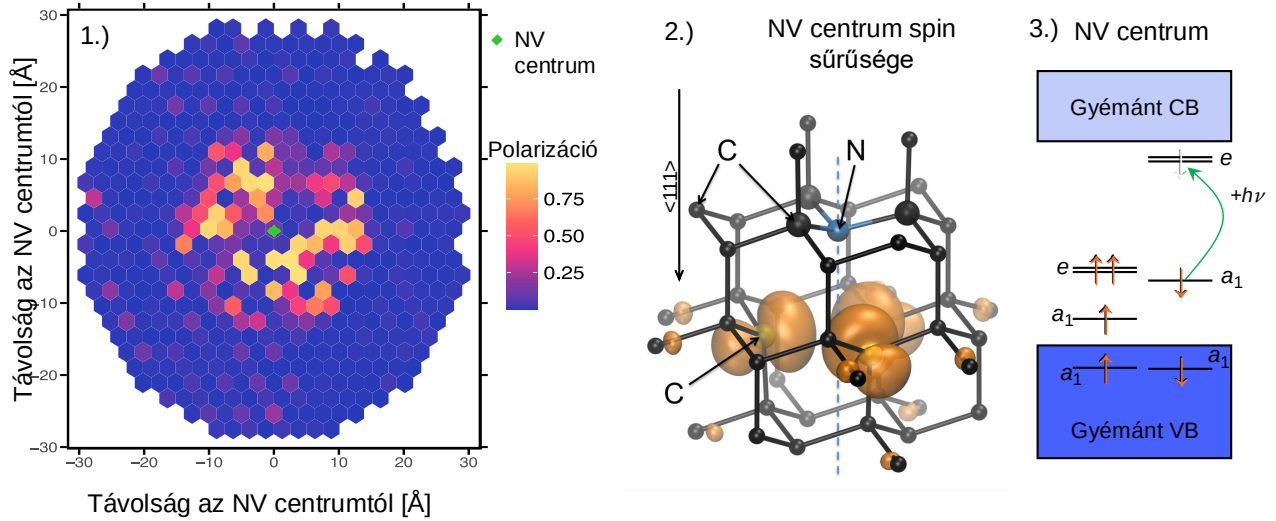
$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_0 + \omega_I \sum_{i=1}^{Nuc} I_z^i + S_z \sum_{i=1}^{Nuc} \mathbf{A}^i \mathbf{I}^i + a \cos(\omega_0 t) (\cos \Phi S_x + \sin \Phi S_y), \quad (0.2)$$

ahol a második tag a nukleáris Zeeman felhasítást írja le a Larmor-frekvencia, ω_I szerint. Itt a nukleáris Zeeman-tag tengelyirányú komponensét veszem figyelembe, amely tovább bontja a rendszer energiaszintjeit. A harmadik tag az elektron- és nukleáris spinek közötti csatolást jelöli, ahol $\mathbf{A}^{(i)} = (A_x, A_y, A_z)^T$ a hiperfinom komponenseket tartalmazza. Az utolsó tag a külső időfüggő mágneses térrel való kölcsönhatást írja le, amely mikrohullámú gerjesztésekért, illetve a pulzusokért felelős. Illetve :

$$a = g_e \mu_b B_{\parallel} \quad (0.3)$$

A hiperfinom interakciók a rácshiba elektronspin-sűrűsége és a nukleáris spinek közötti dipól-dipól kölcsönhatásból erednek. A vakancia spin-sűrűségének kiterjedése miatt a hiperfinom interakció jellemezhető egy rövidtávú kölcsönhatási taggal, amely a spin-sűrűség átfedéséből ered a magspinnel - Fermi csatolás, $\mathbf{A}_{FC}$, és egy hosszútávú dipól-dipól tagra, $\mathbf{A}_{\text{dip}}$. Ezen tagokat ebben a munkában rendre Fermi-kontaktus tagnak és dipól-dipól tagnak nevezem. A Fermi-kontaktus tag különösen jelentős, és egy izotróp hozzájárulást ad a vakancia közvetlen közelében, 1–100 MHz nagyságrendben a rács szomszédos héjainak nukleáris spinjei esetében. A szekuláris közelítésben a Fermi-kontaktus tag fő hozzájárulása így a tenzor A_z komponensében

nyilvánul meg.



0.1. ábra. 1.) Az NV centrum síkjából kivágott kép a gyémánban elhelyezkedő spinek átlagos polarizációjáról a PulsePol protokoll alkalmazása után. Látható hogy a szomszédos spinek melyek erősen csatoltak gyengén polarizáltak, és a protokoll effektíven egy bizonyos tartományon belül képes polarizálni a magspineket. Megfigyelhető továbbá, hogy a 2.)-es ábrán látható spinsűrűséggel korrelál a polarizált spinek elhelyezkedése is. Ugyanis az NV centrum szimmetrikus a $2\pi/3$ szögű forgatásra. A 2.) ábra a gyémánt kristályszerkezetébe beépült nitrogén-vakancia (NV) centrumot mutatja, amelyben egy nitrogénatom és egy hozzá kapcsolódó üres vakancia található. Az NV centrum körüli spin sűrűség térbeli eloszlását narancssárga izo-felületek jelzik, az NV tengely a $[111]$ kristálytengely mentén helyezkedik el. 3.) ábra az NV centrum energiaszint diagramját mutatja a gyémánt sávmodelljében. Az ábrán láthatók a gyémánt vezetési sávja (CB) és vegyértéksávja (VB), valamint az NV központ különálló energiaszintjei, mint az e és a_1 szintek. A zöld nyíl az optikai gerjesztést (foton abszorpciót), a narancssárga nyíl pedig a gerjesztésből történő relaxációs folyamatot jelöli.

A hiperfinom kölcsönhatások lehetővé teszik a polarizáció átvitelét az NV-centrum és a közeli magspinek között, ezáltal megalapozva a polarizációs protokollokat. Ezek a kölcsönhatások az NV-centrumot polarizációs forrásként használhatják a környező

magspinek számára, lehetővé téve ezen spinek közvetett manipulációját és kiolvasását. Ez a képesség olyan fejlett protokollokat támogat, mint a kvantum memória, ahol a polarizált magspinek hosszabb ideig képesek megőrizni az információt, mint az elektronspin, és az érzékenyebb szenzoros alkalmazások, ahol a polarizált magspinek javítják az érzékenységet a külső mágneses terek iránt.

A PulsePol protokoll

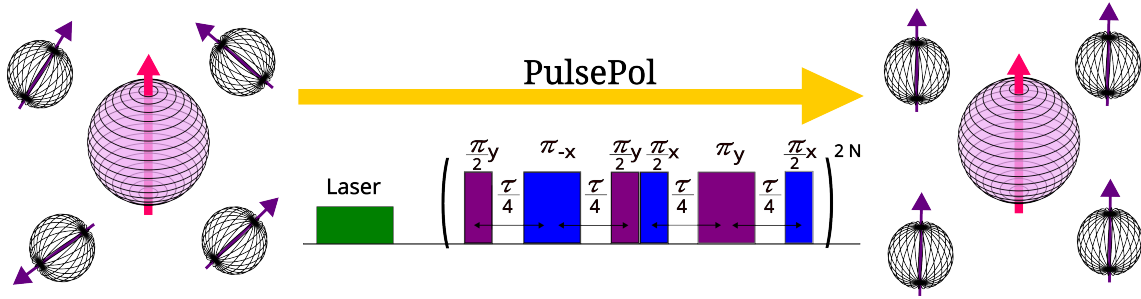
A legtöbb protokoll optikai inicializáláson és periodikus mikrohullámú vezérlési sorozatokon alapul. Az olyan protokollok, mint a NOVEL vagy a PulsePol, ezen ponthiba centrumokon hatnak. A hiperfinom kölcsönhatás következtében az atomi spinek és a ponthiba spin között kapcsolat jön létre, így amikor hatást gyakorlok a ponthibára, közvetetten a legközelebbi atommagok viselkedését is befolyásolhatjuk.

Vizsgálatunk során megfigyeltük a legújabb polarizációs protokollt, a PulsePol protokollt, amelynek célja a maximális polarizációs átvitel elérése az NV-centrum és a közeli nukleáris spinek között dinamikus dekoherencia technikák alkalmazásával. A protokoll a hiperfinom tenzor pszeudo-szekuláris közelítését alkalmazza, ami egy egyszerűsített interakciós Hamilton-operátorhoz vezet:

$$\hat{H} = \Delta S_z + \sum_{i=1}^{Nuc} \omega_I I_z^{(i)} + \sum_{i=1}^{Nuc} S_z (A_x I_x^{(i)} + A_z I_z^{(i)}) + \Omega(t) (S_x \cos \phi + S_y \sin \phi), \quad (0.4)$$

ahol Δ jelöli a mikrohullámú gerjesztés frekvenciája és az atommagok Larmor-frekvenciája (ω_I) közötti eltérést. A munkám során elhanyagolhatom a detuning hatását, mivel annak a rendszer dinamikájára gyakorolt hatása jelentősen kisebb, mint a Hamilton-operátor más interakciós tagjaié.

Az 0.2 ábrán látható sematikus rajz a PulsePol protokoll, mely mikrohullámú (MW) impulzusok sorozatát alkalmazza, amelyek egyenlő időközökre osztva követik egymást egy τ periódussal, amely alatt a rendszer szabadon evolvál. Minden periódus τ négy szegmensre van osztva, és az egymást követő MW impulzusok között $\tau/4$ ideig tart a szabad evolúció. Az MW impulzusok a NV elektronspinjét az X vagy Y tengelyek körül forgatják, a szabad evolúció pedig a precesszáló rendszeren



0.2. ábra. A *PulsePol* protokoll sematikus működése. A vakanciával kölcsönható véletlenszerű (kevert) állapotban lévő magspinjeiken $2N$ db π illetve $\pi/2$ szögű forgatást hajtunk végre, mind x mind y irányba, mikrohullámú gerjesztés segítségével. Ezután egy lézerrel optikailag újrainicializáljuk a vakanciánkat, így tartva fent az NV centrum polarizációját. Ezt N -szer megismételve kapjuk a teljes *PulsePol* polarizációs protokollt, melynek eredményeképpen a rendszerünkben található magspinjeink polarizált állapotba kerülnek.

zajlik:

$$U_{free}(\tau) = \exp \left[-i\tau \sum_i^N (\omega_I I_z^{(i)} \pm S_z (A_x I_x^{(i)} + A_z I_z^{(i)})) \right] \exp(-i\tau \Delta S_z). \quad (0.5)$$

A τ értékét az alábbi módon határozom meg:

$$\tau = \frac{n\pi}{\omega_I}, \quad (0.6)$$

ahol az eredeti [17] *PulsePol* cikkben $n = 3$ értékével sikerült a legnagyobb polarizációs átvitelt elérni, amit a szimulációinkban is alkalmazunk. A protokoll egyik lényeges eleme a gyenge csatolási határmenetben megvalósuló effektív kicserélődési Hamilton operátor. Ez a Hamilton operátor rögzíti az NV elektronspin és a nukleáris spinek közötti interakciókat, elősegítve a koherens dinamikát, ami fokozza a polarizációs átvitelt. A τ értékének megválasztása jelentős hatással van ennek a Hamilton-operátornak a sajátértékeire, biztosítva az elektron- és nukleáris spinek közötti rezonanciát. A τ megfelelő igazítása maximalizálja az átvitel hatékonyságát, míg az eltérés off-rezonáns körülményeket eredményezhet, így csökkentve a hatékonyságot.

Ezenfelül, habár a low coupling limit közelítés egyszerűsíti az elemzést, valós

rendszerek gyakran erősebb hiperfinom kölcsönhatásokat mutatnak. Ezek a kölcsönhatások eltolhatják az energiasajátértékeket és bonyolíthatják a dinamikát, ezért tényleges kísérleti beállításoknál fontos a paraméterek gondos újragondolása. Így bár a protokoll elméletileg robusztus, a gyakorlati megvalósítás gondos finomhangolást igényel, hogy figyelembe vegye ezeket a bonyolultságokat, ami végső soron lehetővé teszi a hatékony polarizációs átvitel megvalósítását kvantuminformációs alkalmazásokban.

Vegyünk egy vakanciát gyémántban, amely mindössze egy magspinnel hat kölcsön egy külső B_0 nagyságú mágneses térben. Egy mikrohullámú gerjesztés mezejében, az NV centrum rotating-frameben felírt Hamilton-operátora így néz ki:

$$\hat{H}(t) = \left[\omega_L \hat{I}_z^{(n)} + \hat{S}_z \left(A_z^{(n)} \hat{f}_z^{(n)} + A_x^{(n)} \hat{f}_x^{(n)} \right) \right] + \Omega(t) \hat{S}_{\varphi(t)}, \quad (0.7)$$

ahol az n -edik spinhez tartozó paraméterek szerepelnek. Itt ω_L a magspin Larmor-frekvenciája, $A_i^{(n)}$ pedig az n -edik mag NV-től mért távolságához viszonyított hiperfinom tenzor i -edik komponense. Az $\Omega(t)$ a mikrohullámú gerjesztés hullámát jelöli, míg $\hat{S}_i$ az $m_s = \{0, -1\}$ qubit bázisban található operátorok. Az $\hat{I}_i^{(n)}$ az n -edik magspin 1/2-es operátorai, és

$$\hat{S}_{\varphi(t)} = \cos[\varphi(t)] \hat{S}_x + \sin[\varphi(t)] \hat{S}_y. \quad (0.8)$$

A rendszer Hamilton-operátor felírása során a rotating-wave közelítést alkalmazhatjuk. Az egyszerűség kedvéért $\hbar = 1$ -et feltételezünk, hiszen CGS mértékegységeket használunk.

A mikrohullámú gerjesztés hullámformája a dinamikus szétcsatolódási protokolltól függ, amelyet alkalmaznak. A PulsePol egy DD protokoll, amelyet dinamikus nukleáris polarizációra használnak, mivel állapot-szelektív. Ennek az impulzusprotokollnak az alakja a következő:

$$\left[(\pi)_y \tau (\pi_{-x}) \tau \left(\frac{\pi}{2} \right)_y \tau (\pi)_x \tau \left(\frac{\pi}{2} \right)_x \tau (\pi)_y \tau \left(\frac{\pi}{2} \right)_x \right]^{2N_p}, \quad (0.9)$$

ahol $(\theta)_\varphi$ egy impulzus $T_p = \theta/\Omega$ időtartammal, és φ fázissal. A vizsgálatom során

én ideális pulzusokkal foglalkoztam, azaz a pulzus hatásának idejét pillanatszerűnek tekintettem. Az impulzusok közötti távolság τ a szabad evolúció/időfejlődés. Az NV-re ható mikrohullámú gerjesztés Rábi-frekvenciáját Ω -val jelöljük. Ez a protokoll periodikus, $T = 4\tau$ periódusidővel, és összesen $T_{\text{tot}} = 8N_p\tau$ ideig alkalmazzák.

A DD gerjesztés hullámformáját felhasználva a rendszert felírhatjuk a hullám framejébe, amelyre a szakirodalom toggling frameként is hivatkozik. Ennek megfelelően a Hamilton-operátor a következő formában írható

$$\hat{H}(t) = \left\{ \omega_I^{(n)} \hat{f}_z^{(n)} + [f_1(t) \hat{S}_x + f_2(t) \hat{S}_y] (A_z^{(n)} \hat{f}_z^{(n)} + A_x^{(n)} \hat{f}_x^{(n)}) \right\}, \quad (0.10)$$

ahol az $f_i(t)$ az i -edik modulációs függvények, melyek periódikusak: $f_i(t+2T) = f_i(t)$ - $2T$ -ben, és lépcsős függvények melyeket így definiálunk:

$$f_1(t) = \begin{cases} 1 & \text{ha } 0 < t < \tau \text{ és } 5\tau < t < 6\tau, \\ -1 & \text{ha } \tau < t < 2\tau \text{ és } 4\tau < t < 5\tau, \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (0.11)$$

és

$$f_2(t) = \begin{cases} 1 & \text{ha } \tau < t < 3\tau \text{ és } 7\tau < t < 8\tau, \\ -1 & \text{ha } 3\tau < t < 4\tau \text{ és } 6\tau < t < 7\tau, \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (0.12)$$

Ezek a függvények periodikusak, ezért a Fourier térben felírva az $f_1(t)$ -re azt kapjuk, hogy

$$f_1(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \left[a_k^{(1)} \cos\left(\frac{k\pi t}{4\tau}\right) + b_k^{(1)} \sin\left(\frac{k\pi t}{4\tau}\right) \right], \quad (0.13)$$

ahol

$$a_k^{(1)} = \frac{1}{k\pi} \frac{1 - (-1)^k}{2} \left[4 \sin\left(\frac{k\pi}{4}\right) - 2 \sin\left(\frac{k\pi}{2}\right) \right], \quad (0.14)$$

$$b_k^{(1)} = \frac{1}{k\pi} \frac{1 - (-1)^k}{2} \left[-4 \cos\left(\frac{k\pi}{4}\right) + 2 \right]. \quad (0.15)$$

Az $f_2(t)$ modulációs függvény szintén hasonló módon található meg, csak a Fourier-

együtthatók, $a_k^{(2)} = -(-1)^{\frac{2k-2}{4}} a_k^{(1)}$ és $b_k^{(2)} = (-1)^{\frac{2k-2}{4}} b_k^{(1)}$, eltérnek az időbeli eltolódás miatt. Az $A_x \ll \pi/\tau$ feltétel mellett, a Hamilton-operátor időfüggését perturbatív módon kezelhetjük a Magnus-kifejtés segítségével. Első közelítésben az időfejlesztő operátor $\hat{U}(2T) = \exp[-i2\hat{H}_{\text{átlag}}T]$, ahol $\hat{H}_{\text{átlag}}$ az időben átlagolt Hamilton-operátor, melyet az alábbi formában írhatunk fel:

$$\hat{H}_{\text{átlag}} = \frac{1}{2T} \int_0^{2T} \hat{H}(t) dt, \quad (0.16)$$

így a pillanatnyi térerősség helyett időben átlagolt térerősségekkel dolgozhatunk. Ez a kis időskálákra vonatkozó feltételezés a magspinhez tartozó kölcsönhatási képpen teljesül az $A_x \ll 1/T$ közelítés mellett. A rezonancia $\tau_r \approx 3\tau/(4\omega_I)$ vagy $k = 3$ választása esetén, az elsőrendű perturbáció időátlagából számolt Hamilton-operátor a következő formában található meg:

$$\hat{H}_{\text{átlag}} = \sum_{n=1}^{N_{\text{nuc}}} \left[g^{(n)} \left(\hat{S}_+^{(n)} \hat{I}_-^{(n)} + \hat{S}_-^{(n)} \hat{I}_+^{(n)} \right) \right], \quad (0.17)$$

ahol feltételezzük, hogy a Hamilton-operátor egy N_{nuc} számú magspinből álló független rendszer. Ahol $g^{(n)} = A_x^{(n)}(\sqrt{2} + 2)/6\pi$ illetve $\hat{S}_{\pm}^{(n)} = \sqrt{2}(\pm\hat{S}_x^{(n)} + \hat{S}_y^{(n)})$.

A PulsePol protokollban az újrainicializálás kulcsfontosságú lépés, amely során az NV-centrum elektronspinje teljesen polarizált $|0\rangle$ állapotba kerül optikai gerjesztés révén. Ez a folyamat alapvető fontosságú, mert az NV-centrum a környező nukleáris spinek számára polarizációs forrásként szolgál. Az NV-centrum polarizációjának visszaállításával minden impulzussorozat után biztosítjuk, hogy folyamatosan új polarizációt juttasson a rendszerbe, ami elengedhetetlen a protokoll hatékonyságának fenntartásához. Újrainicializálás nélkül az NV-centrum fokozatosan elveszítené polarizációját, így csökkentve a rendszer polarizáció transzferjét. Ennek a ciklikus újrainicializálásnak köszönhetően a protokoll jelentősen fokozza az atomjének polarizációját.

Emellett fontos megjegyezni, hogy bár az NV-centrum hatékonyan biztosít polarizációt, a továbbítható polarizáció mennyisége korlátozott. Ezt a korlátozást figyelembe kell venni a rendszer dinamikájának teljes megértéséhez.

A végzett szimulációk alapján kimondható, hogy a protokoll robusztussága a rendszer újrainicializálásának következménye, hiszen így tudunk mindig egy kicsivel több polarizációt csempészni a rendszerbe. A jelenlegi alkalmazások sokkal inkább egy brute-force módszerként használják a protokollt, kihasználva az újrainicializálással nyerhető extra polarizációt, elhanyagolva a szomszédos spinek problémáját. Ezeket jól megfigyelhetjük az 0.1 (1)-es ábrán. Itt látható a PulsePol által biztosított polarizáció. Megfigyelhetjük, hogy a protokoll limitált és jól definiált tartományban képes elérni magas polarizációt. Céлом az volt, hogy ezt a limitált működési tartományt kibővítssem, és egy általánosabb szélesebb körben felhasználható protokollt kaphassanak a kísérleti fizikusok kézbe.

Szimulációs módszerek

Ebben a munkában az NV centrum koherens evolúcióját szimuláltam egy magspin jelenlétében. Az időfejlődést a sűrűségmátrix negyedrendű Runge-Kutta (RK4) módszerrel történő számításával végeztem. A magspineket leíró sűrűségmátrixokat teljesen termikus egyensúlyi állapotban lettek inicializálva. A sűrűségmátrix elemei az NV centrumot és szénatommagokat tartalmazzák. Az időlépés értékét $0,005 \mu\text{s}$ -ra állítottam, és Lindblad-dinamikát nem alkalmaztam (zárt rendszer). A rendszer rögzített időlépéseken keresztül fejlődik, amely során mikrohullámú gerjesztésből származó forgatásokat, illetve szabad időfejlődést kombináltam. A forgatások a sűrűség mátrixon ható operátorokként lettek implementálva. A szimulációban az eredeti cikkben [17] megadott ciklusszámok lettek figyelembe véve és alkalmazva. Az újrainicializálást projektív méréssel valósítottam meg a $|0\rangle$ állapotban.

A modellparaméterek közé tartozott az atommagok Larmor frekvenciája, amelyet az alábbi képlettel határozhatunk meg:

$$\omega_I = \mu_N g_N B, \quad (0.18)$$

ahol μ_N a mágneses atommagra számolt magnetron, $g_N = 1.4048236$ a ^{13}C g -faktora, és B a külső mágneses tér. $B = 1760 \text{ G}$ (0.176 T) nagyságú külső mezőt alkalmaztam annak érdekében, hogy az NV centrum degenerált $|\pm 1\rangle$ állapotai felhasadjanak

és jól definiáltak legyenek. A hiperfinom kölcsönhatásokat a sűrűségfunkcionál elmélet (DFT) segítségével számíthatjuk ki a Ref.[20] alapján. Különösen a hibaközpont környezetében lévő atommagok hosszú hatótávú hiperfinom csatolási paramétereit ($> 10 \text{ \AA}$) egy támogatórácsra végzett valós térbeli integrációs megközelítés segítségével határozták meg. Ez a módszer lehetővé teszi a hiperfinom paraméterek számítását a szupercellán túl, valamint csökkenti a periodikus hibaképekből és a véges méret hatásából eredő hibákat az olyan atommagok esetén, amelyek közel helyezkednek el a szupercella széléhez.

Eredmények

Protokoll limitációi

Polarizáció dinamikai vizsgálatait során jelentős korlátokkal találkoztam, amelyeket a vizsgált atommagok közötti csatolási erősségre vonatkozó feltételezések okoznak. Különösen a mostanáig kidolgozott protokollok a hiperfinom csatolást közelítették és csak a gyengén csatolt rendszereket vették számításba egy-egy protokoll megoldásánál. Ezen közelítés során a dipól-dipól kölcsönhatást tekintik dominánsnak a hiperfinom tenzoron belül, elhanyagolva Fermi-kontakt kölcsönhatásból származó tagokat. Ez a feltételezés pontatlanságokhoz vezethet, különösen az olyan rendszerek esetén, amelyeket erős atommagok közötti csatolás jellemez, ahol a Fermi-kontakt kölcsönhatás összevethetővé, vagy akár dominánssá is válhat a dipól-dipól kölcsönhatással szemben.

Így azon rendszerekben, ahol a közeli szomszédos spineket vizsgáljuk, a polarizáció dinamika eltérő viselkedést mutat, hiszen az $\hat{H}_{\text{átlag}}$ átlagtér Hamilton operátor már nem írja le a rendszer tulajdonságait, ugyanis nem lesz érvényes az alacsony csatolási közelítésből származtatott határfeltétel. Ennek következtében jelentős mértékű polarizációcsökkenés következik be egy teljes polarizációs ciklus után, ha erősen csatolt atommagok is jelen vannak. Ez különösen kritikus, mivel számos gyakorlati szituációban – különösen a defektusok közelében – az atommagok olyan összetett kölcsönhatásoknak vannak kitéve, amelyeket a jelenlegi modellek nem írnak le kellően.

E problémák megoldására olyan szimulációkat alkalmazhatunk, amelyekben nem használjuk a gyenge hiperfinom kölcsönhatás közelítését. Ehelyett a hiperfinom tenzor teljes hatását vizsgálva a polarizációs dinamikára, különös tekintettel arra, hogy a hiperfinom tenzor különböző komponensei – nevezetesen a dipól-dipól és a Fermi-kontakt tagok – miként járulnak hozzá a rendszer polarizációs viselkedéséhez.

A dipól-dipól kölcsönhatás, $\hat{H}_{\text{DD}}$, matematikai formában a következőképpen írható fel:

$$\hat{H}_{\text{DD}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{I}}_j - 3(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{I}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}})}{r^3}, \quad (0.19)$$

ahol $\hat{\mathbf{S}}_i$ elektronspin-operátor $\hat{\mathbf{I}}_j$ az atommagspin-operátor, $\hat{\mathbf{r}}$ a két atommagot összekötő vektor egységvektora, r a távolság közöttük, és μ_0 a vákuum permeabilitása.

Ezzel szemben a Fermi-kontakt kölcsönhatás, $\hat{H}_{\text{FC}}$, az elektronfelhő és az atommagok átfedéséből származik, és az alábbi módon fejezhető ki:

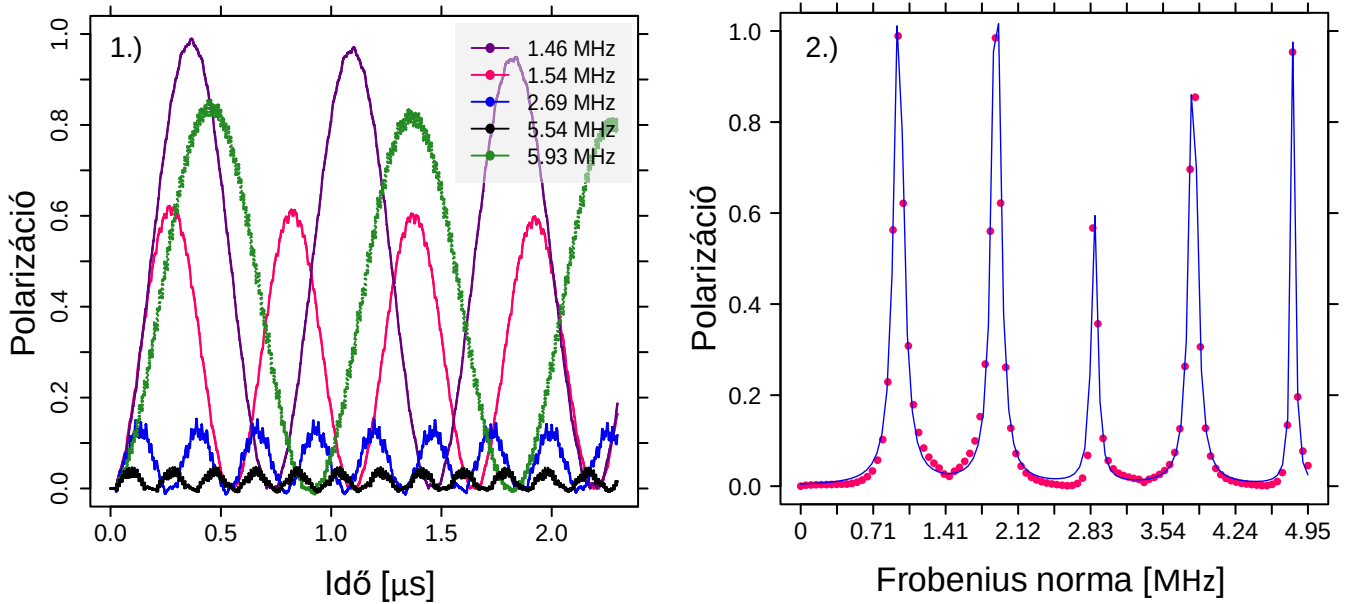
$$\hat{H}_{\text{FC}} = \frac{2\pi}{3} A \hat{\mathbf{I}}_i \cdot \hat{\mathbf{I}}_j \delta(\mathbf{r}), \quad (0.20)$$

ahol A a kontakt hiperfinom csatolási állandó és $\delta(\mathbf{r})$ a Dirac-delta függvény, amely azt jelzi, hogy ez a kölcsönhatás csak akkor jelentős, ha az atommagok szoros közelségben vannak egymáshoz.

A kutatás során célom a csökkent polarizáció okainak feltárása erősen csatolt atommagok esetén, ezáltal átfogóbb megértést nyújtva a komplex rendszerek alapvető fizikájáról. A protokoll viselkedésének vizsgálatát ezekkel az eddig nem figyelembe vett feltételekkel végeztem, amely pontosabb és árnyaltabb megértést tesz lehetővé az atommagspin rendszerek polarizációs dinamikájáról.

Szisztematikus vizsgálat

Az 0.3 ábra 1.) paneljén látható több különböző erősségű csatolással rendelkező magspin, s azt szemlélteti, hogy a csatolásban beállt legkisebb változás is jelentősen befolyásolhatja maximálisan elérhető polarizációt és a spin precessziós frekvenciáját. Ez az eredmény megerősíti a jól ismert elméletet, miszerint a hiperfinom kölcsönhatás alapvető szerepet játszik a spin dinamikájában. Megfigyelhetjük, hogy a protokoll általánosan kölcsönhat minden csatolt spinnel, de ezek a spinek egy jól definiált rezonáns gerjesztésnél polarizálódnak csak megfelelően.



0.3. ábra. 1.) Különböző nagyságú csatolással rendelkező magspinek polarizációja. Látható, hogy adott rendszerek igen vékony optimális frekvencia tartományon reagálnak jól a mikrohullámú gerjesztésre. 2.) Adott szimulációban a 4. szomszéd magspin csatolását skáláztam, így annak pozíciója nem, csak hiperfinom csatolása változott. Látható, hogy élesen elhatárolt rezonáns frekvenciákon vagyunk képesek gerjeszteni, így a gyémántban létrejönnek "sötét helyek", amik az off-rezonanciájuk miatt nem képesek polarizálódni.

Ezt követően elkezdtem vizsgálni azokat a rendszereket, ahol kiválasztottuk a második szomszédos szénatomot. Azután a teljes hiperfinom kölcsönhatást a nitrogén-vakancia (NV) központ és ezen legközelebbi szomszéd között nulláról skáláztam fel. Az 0.3 ábra 2) panele arra a fő kérdésre keresi a választ, hogy a hiperfinom kölcsönhatás változásai miként befolyásolják a rendszer dinamikáját.

A vizsgált spin Frobenius normája 4,53 MHz volt. A kiválasztott spin csatolását, 0 MHz-es csatolástól kezdtük skálázi, aholis következetesen 5%-kal növeltük minden szimuláció során a kölcsönhatás erősségét.

Nagyobb skálán várható a polarizációs rátában egy bizonyos periodicitás, különösen olyan konfigurációk esetén, ahol $n = 6, 9, 12$. Ezek az elrendezések erős Fourier-komponenseket sugallnak a protokoll effektív Hamilton-operátorában. Azonban fon-

tos megjegyezni, hogy bár ilyen periodikus viselkedés várható, ez nem jelenti azt, hogy maguk a hiperfinom kölcsönhatások is szigorúan periodikusak; inkább azt jelzi, hogy a polarizáció dinamikája bizonyos távolságokon rezonáns viselkedést mutat.

A 0.3 ábra 2) panelén látható, hogy az eredeti paraméterek alkalmazása lehetővé teszi rezonáns frekvenciák azonosítását, ahol az impulzusprotokoll hatékonyan tud optimális polarizációt elérni. Ez megerősíti azt az elképzelést, hogy bizonyos konfigurációk kiszámítható eredményeket hozhatnak, a jól ismert elvekre alapozva.

A kristályrácsban elhelyezkedő magspinek térszerű vizsgálata során azt találtam, hogy vannak meghatározott távolságok a vakanciától, ahol a magok rezonáns hiperfinom kölcsönhatást mutatnak, tovább erősítve a jóslatainkat.

Bár az optikai újrainicializálás nem alkalmaztam még ezen a ponton a szimulációinkban, érdemes megjegyezni, hogy depolarizációt figyeltünk meg hosszabb futású ciklusok során. A polarizáció romlását vagy dekoherencia, vagy numerikus hibák okozzák a szimulációban. Egy több komponensű eset feltételezése mellett azt gondolhatjuk, hogy a megfigyelt depolarizáció a rendszer időbeli viselkedésének elvárt jelenségét követi. A rendszer koherens oszcillációkat mutat, időbeli periodicitása pedig nyilvánvaló. Azonban a maximális polarizáció csökkenését óvatosan kell értelmezni, mivel előfordulhat, hogy a numerikus artefaktumok miatt jelentkezik, nem pedig valódi fizikai jelenséggént, hacsak ezt a megfigyeléseink nem erősítik meg ábráinkban.

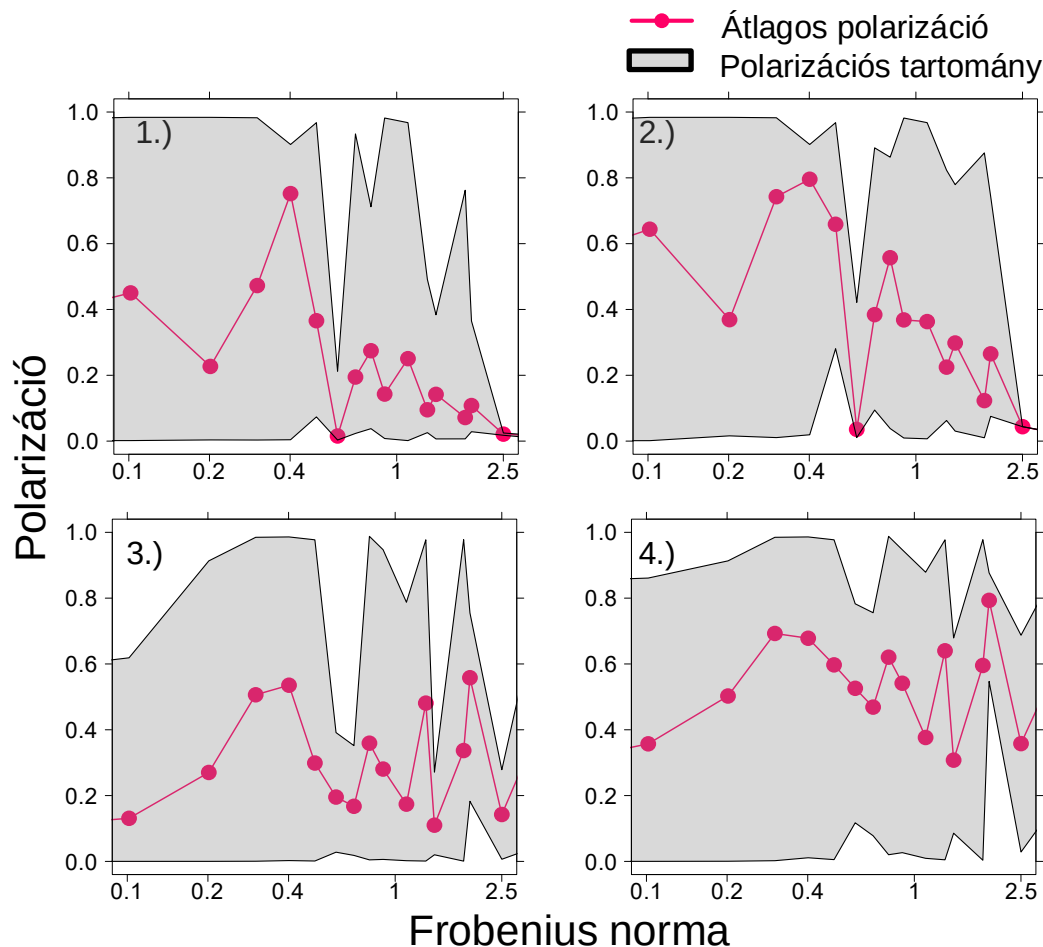
A polarizációs viselkedésének megértése érdekében először egyetlen szénatom esetét vizsgáltam meg részletesen. Itt a C(13) mag hiperfinom értékeit vesszük figyelembe, összesen 10000 rácspontot vizsgálva az NV centrumtól távolodva. Az eredeti τ időt alkalmaztam, és minden 50. ciklus után újrainicializáljuk az NV-központot, ahogy azt a eredeti [17] cikkében javasolták.

Elsősorban arra törekedtem, hogy azonosíthatóvá tegyem a polarizációt befolyásoló főbb tényezőket. Ezért külön vizsgáltam meg a protokoll MW gerjesztési részét, amely a polarizáció átvitelére hivatott a rendszerünkben. Ha két hasonló Frobenius normájú hiperfinom csatolású spinünk van, miért mutatnak különbséget a polarizációjukban? Van-e olyan tényező, amely negatívan befolyásolja a polarizáció átvitelt? Ennek vizsgálatához először a polarizáció hiperfinom tenzort függését vizsgáltam

meg, majd arra kerestem a választ, hogyan polarizálhatjuk az erős csatolással rendelkező közeli szomszédokat. Az első néhány szimuláció után megállapítottam, hogy a Fermi-kontakt kifejezetten hatásos a továbbított polarizáció csökkentésében. Ezt követően arra törekedtem, hogy meghatározzam, hogyan lehet a legközelebbi szomszédokat erős csatolással polarizálni. Illetve vizsgáltam ezek mellett a rendszerek újrainicializálásának hatását a polarizáció transzferre. A 0.5 ábra (2) panelje világosan szemlélteti, hogyan működik az újrainicializálás. Az ábra 15 teljes ciklust ábrázol, bemutatva a rendszerre alkalmazott optikai pumpálás hatásosságát. Minden teljes ciklus után a rendszer teljes polarizációja növekszik, különösen hatékonyságot viszont az első 5-6 ciklus során érhetünk el. Ezt a kezdeti fázist követően a görbe telítődési jeleket mutat, hasonlóan a mágneses rendszerekhez. Ezt a viselkedést a csatolási erősség is befolyásolja.

A 0.4 ábra (1) és (2) paneljén a teljes hiperfinom tenzort alkalmaztam. A 0.4(1) és (3) ábrákon nem használtam optikai újrainicializálást, míg a 0.4(2) és (4) ábrákon a teljes PulsePol protokollt —beleértve az optikai pumpálást is— alkalmaztam. Fontos megjegyezni, hogy az újrainicializálás bevonása lehetővé teszi azt, hogy a rendszer magasabb átlagos polarizációt érjen el.

Bár a görbék hasonlóknak tűnnek a közös adatpontok miatt, a maximálisan elérhető polarizációt jelentősen befolyásolja a csatolási erősség. Különösen, a közepes csatolási erősség biztosítja a legjobb polarizációt, ami kompromisszumot jelent a csatolási erősség és az optimális várakozási / szabad evolúciós idő között.



0.4. ábra. 1.) Teljes hiperfinom tenzor - újrainicializáció nélkül 2.) Teljes hiperfinom tenzor újrainicializálással 3.) Hiperfinom tenzor a diagonális tagok nélkül 4.) Hiperfinom tenzor diagonális tagok nélkül, újrainicializálással. A szimulációk során 10,000 különböző kristályrácspontot vizsgáltunk meg, majd az eredményeket átlagoltuk. A szimulációk célja annak vizsgálata, hogyan változik a polarizációs viselkedés az egyes helyeken, ha a Fermi-csatolás nem lenne jelen. Összességében megállapítható, hogy a gyengén csatolt rendszerekben, ahol a Fermi-csatolás amúgy sem játszik jelentős szerepet, annak eltávolítása nem okoz lényeges változást, amit előzetesen vártunk. Ugyanakkor azokban a rácspontokban, amelyek közel helyezkednek el az NV centrumhoz, megfigyelhető a polarizáció növekedése. Érdekes megjegyezni, hogy a Fermi-csatolás eltávolításával nem tapasztalunk olyan jelentős csatolási változást, mint amit a 0.5 1.) ábrából várnánk. Ennek megértéséhez figyelembe kell venni, hogy az erősen csatolt rendszerekben a dipólus interakció már elegendő mértékben eltolja a rezonancia frekvenciát, hogy a rezonáns rácspontok áthelyeződnek a kristályrácsban belül. Továbbá megfigyelhető, hogy az újrainicializálás átlagosan 20-30%-kal képes növelni a rendszernek áthadható polarizációt.

Rendszerünket tehát három tartományra bonthatjuk: az első tartomány erősen csatolt magokból áll, ahol a Fermi-csatolás dominál; a második tartományban azonos erősségű fermi és dipólus tagok jellemezik a hiperfinom tenzort; a harmadik tartomány pedig gyengén csatolt szénatomokat tartalmaz, ahol a Fermi-tag elhanyagolható, így a dipólus kölcsönhatás válik dominánssá. Ezen részek között egy folytonos átmenetet kell elképzelni a polarizáció szempontjából. Tehát amint megfelelő erősségű lesz a dipól csatolás úgy növekszik a polarizáció, s közben a Fermi csatolás csökken tovább növelve az elérhető polarizációt. Viszont a dipólus lecsengési tulajdonságai miatt, távolabb annyira gyenge lesz a csatolás, hogy a polarizációs transzfer nem lesz jelentős, hiszen a kölcsönhatás gyengülése miatt nem tud átadódni a polarizáció. Az első és a harmadik tartományban a csatolás nem optimális az általunk beállított várakozási időhöz, mert a csatolás az NV központtal vagy erősebben, vagy gyengébben történik. Ez arra utal, hogy a kezdeti várakozási idő meghatározza azt a tartományt, amelyen belül a protokoll hatékony.

A 0.4(3) és (4) ábrákon kizárólag a hiperfinom tenzor off-diagonális elemeire összpontosítottam, amelyek a dipól-dipól kölcsönhatásért felelősek.

Az erős csatolás esetében jelentős eltolódás figyelhető meg a várakozási időben, amely csökkenti a maximális polarizációt a protokoll frekvenciaeltérése miatt. Ezzel szemben az alacsony csatolási közelítésben számolt várakozási idő igen nagy polarizációt tud elérni, de hosszabb ideig kell alkalmazni a protokollt, hogy jelentős polarizációt érjünk el, még újrainicializálással is.

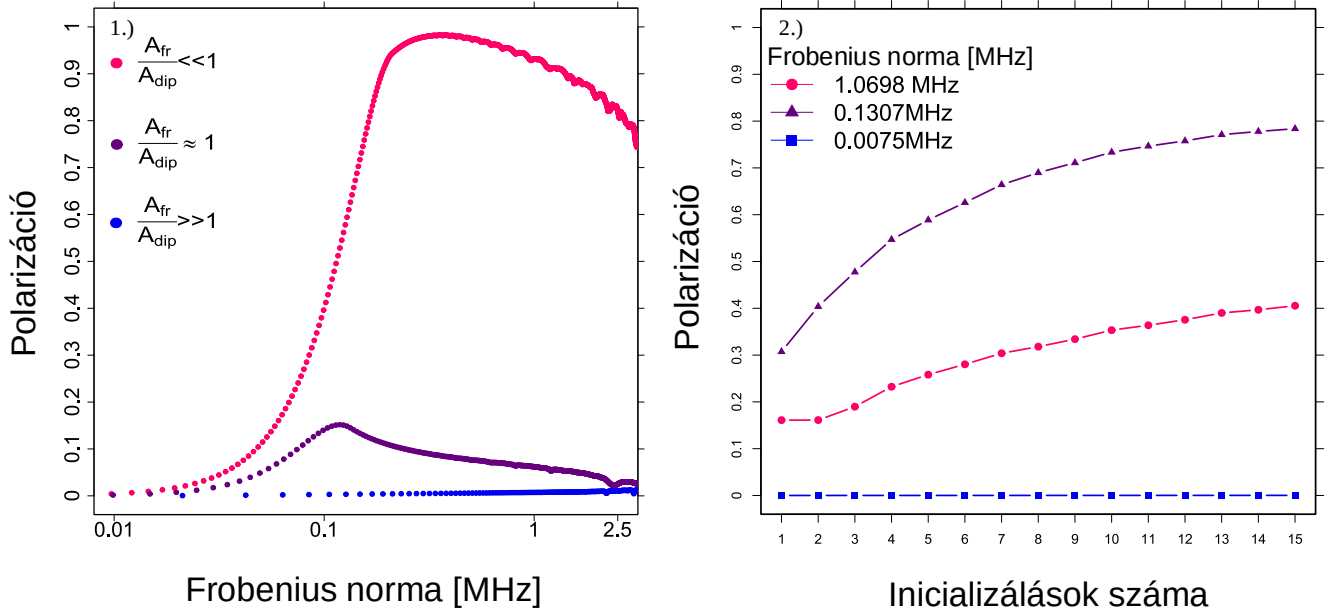
Itt látható a polarizációs görbén az $1/r^2$ viselkedést figyelhetünk meg. Tehát a Fermi-kontakt interakció nélkül a polarizáció kizárólag a távolságtól függ - mint ahogy azt vártuk a dipólus csatolástól. Az optikai újraindítással végzett szimulációk csak a protokoll tartományát bővítik ki, bizonyos rezonanciákra effektíven - de az offrezonáns gerjesztéseknél nem figyelhetünk meg sokkal magasabb polarizácót.

A vizsgálat során nagyrészt a protokoll első részére összpontosítottam, kihagyva az optikai újrainicializálási lépést. Konkrétan a protokoll kezdeti fázisát alkalmazzuk, amely ismétlődő mikrohullámú impulzusokat és időfejlődést tartalmaz (mw impulzusok + időfejlődés)ⁿ, hogy megfigyeljük a rendszer viselkedését. Ez a megközelítés lehetővé teszi, hogy tisztán megértsük, hogyan befolyásolja a hiperfi-

nom tenzor a rendszert.

A hiperfinom tenzor és a polarizáció transzfer hatékonysága közötti kapcsolat megértéséhez azt 0.5(1) ábra illusztrálja, hogy különböző kapcsolatok hogyan befolyásolják a polarizáció hatékonyságát. Az ábra három jól definiált magot mutat a kristályrácsból, mindegyikük eltérő arányú Fermi és dipólkomponensekkel rendelkezik a hiperfinom tenzorban. Ezeket a tenzorokat különböző kristályrács-régiók polarizációjának vizsgálatára skáláztam.

Ha a Fermi-kontaktus dominálja a rendszert jellemző kapcsolatot a polarizáció átvitel hatékonysága alacsony; ez a fajta csatolás nem képes effektív polarizáció átvitelre spin rendszerek között. Ezt az interakciót sajnos nem lehet figyelmen kívül hagyni a valós rendszerekben, ennek következtében jelentős nehézségeket jelent a legközelebbi magok polarizálásában az NV központ körül.



0.5. ábra. 1.) A magspin polarizációs tulajdonságait jelentősen befolyásolja az adott spin távolsága az NV centrumtól. Az ilyen rendszerek három különböző tartományra oszthatók attól függően, hogy a Fermi-csatolás és a dipól-dipól kölcsönhatás milyen arányban van jelen. Az első tartományban a Fermi-csatolás dominál, és a magspin a vakancia közelében helyezkedik el, így az eredeti protokoll használatával nem figyelhető meg jelentős polarizáció. A második tartományban a Fermi-csatolás és a dipól-dipól kölcsönhatás hasonló nagyságrendűek, és a dipól-dipól kölcsönhatás révén polarizáció jelenhet meg a rendszerben. A harmadik tartományban a magspin elég messze helyezkedik el a vakanciától ahhoz, hogy a Fermi-csatolás ne gyengítse a polarizációs átvitelt, így a polarizáció könnyebben megvalósul. 2.) A rendszer viselkedése újrainicializáláskor is érdekes viselkedést mutat. Ugyanis a visszapolarizált vakancia a leghatékonyabban az első 5-6 újrainicializációs ciklusban működik. Ha a magspin az off-rezonancia tartományban helyezkedik el, akkor újrainicializálással sem érhető el polarizáció átadása a spinre. Megfigyelhető ezek a polarizációs görbék egyfajta hiszterézis szerű telítődést mutatnak

Az alacsony csatolási limit esetén, ahol $\frac{F_{ermi}}{D_{ip}} \ll 1$, a Fermi-kontaktusnak nincs jelentős hatása a protokollra, szinte tökéletes polarizációt engedve ezzel meg. Ez azt jelzi, hogy a kristályrácsban belüli kölcsönható magok elegendő távolságra vannak, hogy a Fermi-hatás elegendően redukálódjon, akkor a polarizáció tökéletes lesz.

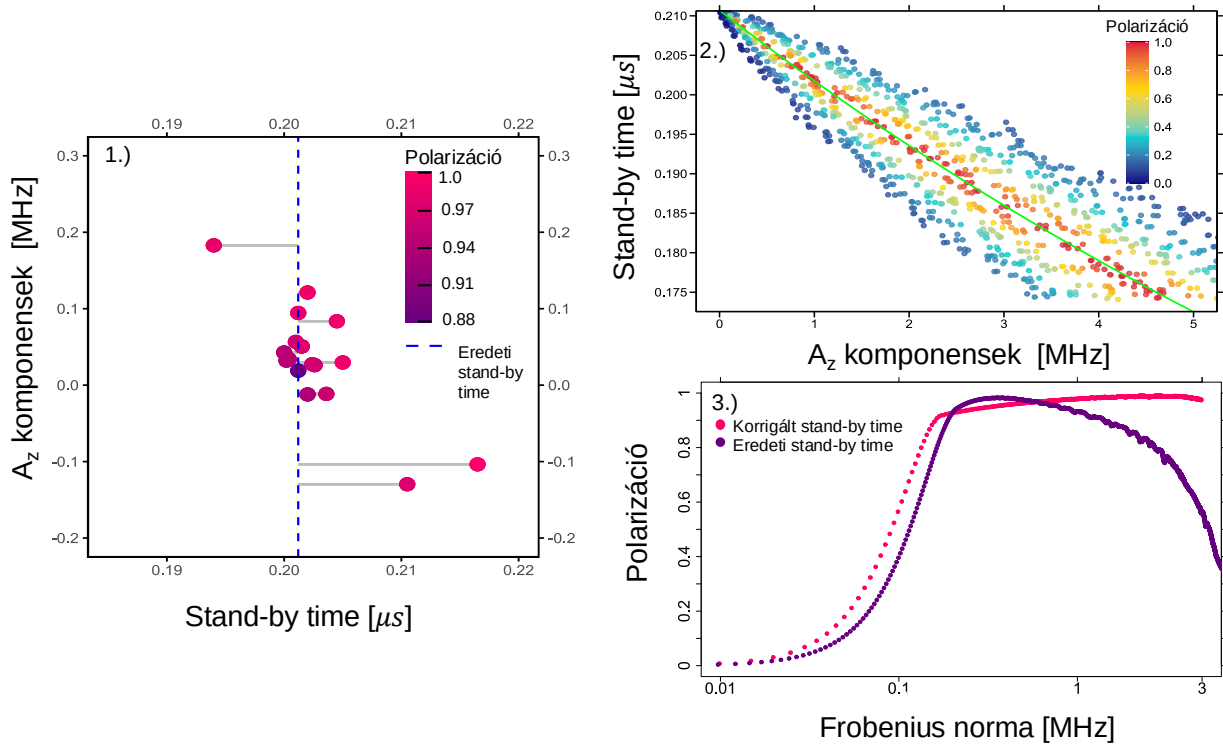
Azonban érdemes megjegyezni, hogy még az erős dipól-dipól interakció is hatással van a polarizáció hatékonyságára, bár kisebb mértékben, mint a Fermi-kontaktus. Viszont valós kristályokban nem létezik olyan hely ahol a dipól csatolás annyira erős legyen hogy elrontsa a polarizációt, hiszen 3 nagyságrendi eltérés van a két csatolás között, ezért ahol már a Fermi csatolás lecsengett ott sem lehet olyan erős a dipólus csatolás, hogy az erősen befolyásolná a transzfert.

A Fermi-kontakt abszolút nagysága egyértelműen jelzi jelentős hatását a "stand-by time" eltolódására, sokkal inkább, mint a dipólus komponensek. Ennek eredményeként arra a következtetésre jutottam, hogy az erősen csatolt rendszerekben a Fermi-kontaktus a legdominánsabb tényező, amely jelentős depolarizációs hatást eredményez a rendszerekben.

Korrekcio meghatározása

Amint azt korábban kifejtettem, a PulsePol protokoll teljesítménye jelentősen csökken az erős hiperfinom csatolással rendelkező spinek esetén, és nem képes megfelelő nagyságú polarizációt elérni ezeken a magokon.

A hiperfinom csatolás függő teljesítmény magyarázatára feltételeztük, hogy az erős hiperfinom hatás következtében a protokollban definiált várakozási idő eltolódik az eredeti magspin precesszióhoz képest. Ennek következtében kivizsgáltam, hogy az erősen csatolt rendszerek milyen módon tolódnak el, milyen a rendszert jellemző tulajdonsággal tudjuk leírni legjobban az eltolást. Ennek vizsgálata során arra a következtetésre jutottam, hogy a hiperfinom kölcsönhatás, annak is különösen az A_z komponensei, képesek jelentősen eltolni az elektron-magrendszer energiaszintjeit 0.6(1). Az általunk vizsgált térrel merőleges A_{zz} egy Fermi csatolást is tartalmazó tag tölti be a legdominánsabb szerepet. Egy ilyen eltolódás megváltoztatja a rezonanciafrekvenciát is, ami a mikrohullámú gerjesztés során az eltolódik az eredeti magspin állapotokhoz képest. [18].



0.6. ábra. 1.) A szimulációk során megfigyeltem, hogy a szabad időfejlődés alatt az adott A_z komponensekkel rendelkező magspinek optimális polarizációjához tartozó várakozási idő jelentősen eltér az eredeti definíció alapján számított értéktől (kék szaggatott vonal). A rendszernek az A_z hiperfinom komponensekre való érzékenysége indokolta a következő elemzést. 2.) Az új szimulációban közel ezer rácspontot vizsgáltam meg egy nagy csatolási skálán, azzal a céllal, hogy meghatározzuk, hangolható-e a magspinek polarizációja a várakozási idő finom beállításával. Eredményeink alapján a stand-by time finomhangolásával minden csatolási frekvenciára elérhető egy majdnem teljes polarizációs állapot. 3.) A sajátértékekből számított korrekciós tag bevezetése után látható, hogy a magas polarizációval rendelkező tartomány kiterjeszthető a vakanciával szomszédos, erősen csatolt magspinekre is, ezzel új lehetőségeket teremtve az ilyen rendszerek precíziós hangolásában. Ez a megközelítés alapvetően hozzájárulhat a magspinek polarizációjának dinamikus vezérléséhez különböző csatolási környezetekben, és jelentős előrelépést jelenthet az adott kvantumrendszerek stabilitásának és irányíthatóságának javításában.

Ezek alapján megállapíthatjuk, hogy a hiperfinomom kölcsönhatás tehát megváltoztatta a rendszer energiaszintjeit, ezáltal befolyásolva a polarizáció átviteli dinamikáját. Pontosabban, a magspin effektív precessziós frekvenciája az erős hiperfinom-kölcsönhatások miatt eltolódik. Így az erre a frekvenciára épülő szabad időfejlődési

ablakok nem lesznek szinkronban a rendszerrel.

Amint az a 0.6(2) ábrán látható, az A_z komponensek vizsgálata során, hogy az eredetileg meghatározott optimális készenléti/ szabad időfejlődési idő egyértelműen eltolódik amint a rendszerben jelentősebb 100 kHz feletti A_z komponensű hiperfinom csatolás jellemző. Az általam használt és definiált korrekcióval lefutottatok szimulációk során 0.6(3) ábra, látható ha figyelembe vesszük az energia sajátértékeiben bekövetkező eltolódást, majd ezzel definiáljuk a "stand-by time-ot" azaz a szabad időfejlődést, akkor látható, hogy majdnem tökéleteses polarizáció érhető el már 50 mikrohullámú ciklussal is, újrainicializálás nélkül. Így kimondhatjuk hogy sikerült a protokollt még effektívebbé tenni, ugyanis már az eredeti cikkben definiált újrainicializálás nélkül is, át tudtuk vinni akkora polarizációt, hogy az a rendszerben található magspinünket teljesen polarizálttá tegye.

Az Eq. (0.6) szerinti standby-idő választása alapján az eltolódás egy további hasadásnak tulajdonítható a magspin-állapotok energiakülönbségében, ω_I . Ezen feltételezés szerint a Hamilton-operátorral leírt elektron-magrendszer sajátértékei az Eq. (0.4) esetében, mikrohullámú gerjesztés nélkül egyetlen magra vonatkozóan a rendszer sajátértékei a következőképpen alakulnak:

$$\lambda = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\omega_I \pm \frac{A_z}{2}\right)^2 + \left(\frac{A_x}{2}\right)^2 + \left(\frac{A_y}{2}\right)^2}, \quad (0.21)$$

ami a magspin-állapotok közötti korrigált rezonanciafrekvenciát adja:

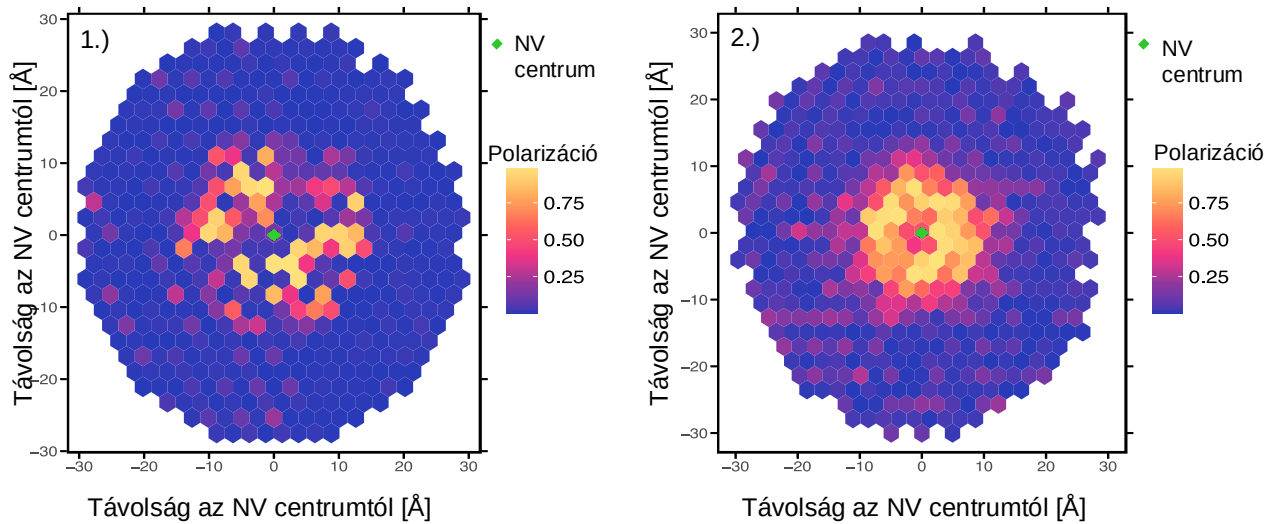
$$\omega_c = \sqrt{\left(\omega_I \pm \frac{A_z}{2}\right)^2 + \left(\frac{A_x}{2}\right)^2 + \left(\frac{A_y}{2}\right)^2}, \quad (0.22)$$

ahol az A_z tag előjele pozitív és negatív az elektronspin állapotának magasabb és alacsonyabb energiájú állapotát is figyelembe veszi.

A készenléti idő eltolódása, amelyeket az Eq. (0.22) precessziós frekvenciaként való alkalmazásával számoltam ki az Eq. (0.6) alapján, a 0.6(2) ábrán látható. Teljes átfedést figyeltünk meg a szimulációk során talált optimális szabad időfejlésztési a skálázott rendszer esetében.

A polarizáció teljesítménye a szokásos és korrigált standby-timeok között a 0.6(3)

ábrán látható. Mindkét esetben a kis hiperfinom-értékek esetén a szimuláció időtartama korlátozó tényező, de a korrigált értékek egy bizonyos csatolási küszöb felett már ugyanazon idő alatt jelentősen nagyobb polarizációt érnek el. A szokásos választás optimálisnak tűnik a közel 100%-os polarizációjú plató tartományában ami viszont egy igen szűk régióját fedi le a rendszerünknek. Így a standard szabad időfejlészési ablakkal történő polarizáció hamarosan nem lesz optimális a növekvő hiperfinom csatolás mellett, mivel a mag rezonancia frekvenciája elhangolódik. Ebben a tartományban jelentős javulást figyelhetünk meg a polarizáció hatékonyságában a korrigált standby-time esetén. Ez az energia sajátértékekből adódó korrekció hatékonyan leküzdötte a protokoll korlátait az erős hiperfinom-kölcsönhatások kezelésében, ami sokkal nagyobb polarizációátvitelt eredményezett.



0.7. ábra. 1.) Az eredeti cikkben meghatározott protokoll által elérhető polarizáció az NV centrum síkjában. 2.) A korrigált protokoll által elérhető polarizáció az NV centrum síkjában

A 0.7 (1) ábrán láthatjuk az eredeti [17] cikkben meghatározott PulsePol protokoll által elérhető polarizációt. 0.7 (2) ábra bemutatja az általam optimalizált protokoll eredményét, amely nemcsak nagyobb mértékű polarizációt biztosít, ha-

nem általánosabb és robusztusabb teljesítményt is nyújt az NV centrum környezetében. A javított protokoll nagyobb polarizációs hatékonyságot ér el szélesebb tartományban, így alkalmazhatósága és teljesítőképesége is jelentősen kibővült. A közeli erősen csatolt magspineket sikerült polarizálni, illetve elmondható hogy a rendszer összpolarizációja szignifikánsan javult.

Összegzés és kitekintés

A jelen kutatás középpontjában a PulsePol protokoll teljesítményének elemzése áll, különös figyelmet fordítva a hiperfinom kölcsönhatások és a magspin polarizációjának kapcsolatára. Az eddigi eredmények azt mutatják, hogy a hiperfinom kölcsönhatások, különösen az A_z paraméter, lényegesen befolyásolják az elektron-magrendszer energiaszintjeit, így hatással vannak a rendszer rezonanciafrekvenciáira és a polarizáció átviteli dinamikájára.

A kutatásom során kiderült, hogy a PulsePol protokoll teljesítménye jelentősen csökken az erős hiperfinom-csatolás esetén, különösen az NV center közelében lévő magspin polarizációjának elérésében. A kísérletek során a realizált polarizáció értékei jelentősen alacsonyabbak voltak, mint amit az erősen kötött magok esetében várható volna. A hiperfinom kölcsönhatások figyelembevételével végzett analízis során megállapítottam, hogy az optimális szabad időfeljesztési időablak eltolódása a rendszer energiaszintjeiben bekövetkező változásokkal áll összefüggésben. Az optimális készenléti idők pontos meghatározása nemcsak a magspin precessziós frekvenciájának javítását eredményezheti, hanem a kvantuminformációs rendszerek teljesítményének általános növelését is. Jövőbeli kutatásaink során további vizsgálatokat tervezünk más kvantumállapotokkal és különböző anyagokkal, hogy a hiperfinom kölcsönhatásokat még szélesebb kontextusban értelmezhesük.

A kutatás eddigi megállapításai jelentős lökést adhatnak a kvantumtechnológiák fejlődésének, különösen a kvantumszámítás és kvantumkommunikáció terén. A hiperfinom kölcsönhatások jobb megértése lehetőséget biztosít a kvantumállapotok hatékonyabb manipulálására, amely kulcsszerepet játszhat a kvantum-információs illetve a kvantum-érzékelésen alapuló rendszerek optimalizálásában. Az eddigi eredmények megerősítik, hogy a hiperfinom kölcsönhatások és a polarizáció dinamikája közötti összefüggések vizsgálata nemcsak tudományos, hanem gyakorlati jelentőséggel is bír. A jövőbeli munkák során a mélyebb elméleti elemzések és kísérletek segíthetnek a protokollok optimalizálásában, lehetővé téve a magasabb szintű kvantumszámítási teljesítményt és a hatékonyabb kvantumkommunikációs rendszerek ki fejlesztését.

Folytatván az eddigi munkát, jelenleg is tart a kettő illetve három magspint tartalmazó rendszerek szimulációjának kiértékelése, az eddig megismert eredmények értelmezése és implementálása a többspines rendszerekre. Céлом egy olyan, a fenti tulajdonságok alapján továbbfejlesztett protokoll létrehozása, amely effektívebben és költséghatékonyan képes a teljes rendszert polarizálni. További kitűzés az 'elektron tenger' implementálása, azaz olyan rendszerek vizsgálata, ahol a kristályrácsban szabad elektronok is találhatóak. Az így megszerzett tapasztalatokat kísérleti csoportokkal együttműködve, számukra is könnyen implementálható, a kísérletek színterére igazított megoldásokká szeretném formálni.

Függelék

Raabi-oszcilláció

A Raabi-oszcilláció a kvantummechanikai rendszerek egy kétállapotú rendszer (spin vagy kvantumbit) energiaszintjei közötti periodikus átmenetet írja le, amit külső elektromágneses mező gerjesztése idéz elő. A jelenség megértéséhez használhatjuk a kétállapotú rendszer Hamilton-operátorát, amely külső mágneses mező hatása alatt a következőképpen írható fel:

$$H = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z - \frac{\hbar\Omega}{2}(\sigma_x \cos(\omega t) + \sigma_y \sin(\omega t)), \quad (0.23)$$

ahol ω_0 a rendszer sajátfrekvenciája, Ω a Raabi-frekvencia, amely a gerjesztő mező intenzitásától függ, σ_x , σ_y , és σ_z a Pauli-mátrixok, illetve ω a gerjesztő mező frekvenciája. Ha $\omega = \omega_0$, akkor rezonancia áll fenn, és a kétállapotú rendszer maximális átmeneti valószínűséggel oszcillál. Az időben változó valószínűsége, hogy a rendszer a kezdeti állapotában marad, így kifejezhető:

$$P(t) = \cos^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right), \quad (0.24)$$

ahol $\Omega = \gamma B_1$ a Raabi-frekvencia, és γ a rendszer gyromágneses aránya, B_1 pedig a külső mágneses tér. A Raabi-oszcillációk alapvető szerepet játszanak kvantumkapuk és kvantum-alapú számítási műveletek megvalósításában, mivel lehetővé teszik a kétállapotú rendszerek gyors és pontos vezérlését.

Larmor-frekvencia

A Larmor-frekvencia egy mágneses térben elhelyezkedő spin-polarizált részecske precessziójának frekvenciája, amely a külső mágneses tér és a spin közötti kölcsönhatás eredményeként jelentkezik. A Hamilton-operátor egy spin- $\frac{1}{2}$ részecske esetén, amely egy homogén B_0 mágneses térben helyezkedik el, így írható fel:

$$H = -\gamma B_0 \sigma_z, \quad (0.25)$$

ahol γ a gyromágneses állandó és B_0 a mágneses tér nagysága. Az energiaeigenértékek a következők:

$$E_{\pm} = \pm \frac{\hbar\omega_L}{2}, \quad (0.26)$$

ahol $\omega_L = \gamma B_0$ a Larmor-frekvencia, amely meghatározza a spin precessziós sebességét a tér irányában. Az ilyen precesszió a következő időfüggő állapotot eredményezi:

$$\psi(t) = \cos\left(\frac{\omega_L t}{2}\right) |0\rangle + i \sin\left(\frac{\omega_L t}{2}\right) |1\rangle, \quad (0.27)$$

amely leírja, hogy a spin az idő során hogyan precesszál a külső mágneses tér irányában. A Larmor-precesszió jelentős szerepet játszik a mágneses rezonancián alapuló jelenségekben, mint például az MRI és NMR, ahol az egyedi részecskék rezonanciafrekvenciájának vizsgálata lehetővé teszi a helyi mágneses tér feltérképezését.

$$\alpha |\uparrow\rangle \pm \sqrt{1 + \alpha^2} e^{i\phi} |\downarrow\rangle$$

DNP - Dinamic Nucleon Polarization

A DNP során a rendszer elektronokból és magokból áll, melyek spinállapotaikkal kölcsönhatásba lépnek. A kölcsönhatás energiája a spinrendszerek közötti dipól-dipól csatolás formájában írható le, amelyet a következő Hamilton-operátorral adunk meg:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{elektron}} + \hat{H}_{\text{mag}} + \hat{H}_{\text{közös}} \quad (0.28)$$

ahol $\hat{H}_{\text{elektron}}$ az elektronspin-rendszer Hamilton-operátora, $\hat{H}_{\text{mag}}$ a magspin-rendszer Hamilton-operátora, és $\hat{H}_{\text{közös}}$ a két rendszer közötti kölcsönhatást leíró Hamilton-operátor.

A kölcsönhatás Hamilton-operátorának formája:

$$\hat{H}_{\text{közös}} = A \sum_{i,j} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{I}_j) \quad (0.29)$$

ahol A a csatolási konstans, $\mathbf{S}_i$ az i -edik elektron spinoperátora, és $\mathbf{I}_j$ a j -edik magspinoperátora. E kölcsönhatás révén az elektronok polarizációját átvihetjük a ma-

gokra.

A DNP folyamat három fő mechanizmusa a következő: szolid-effektus, cross-effektus és termikus keveredés. Ezek a mechanizmusok különböző energiacsatolási mechanizmusokat írnak le a spin-rendszerek között.

A szolid-effektus akkor lép fel, amikor az elektron-spin rezonancia (ESR) frekvencia pontosan illeszkedik a nukleáris mágneses rezonancia (NMR) frekvenciájához, az alábbi feltétel teljesülése mellett:

$$\omega_{\text{ESR}} = \omega_{\text{NMR}} \pm \omega_e \quad (0.30)$$

ahol ω_{ESR} az ESR frekvencia, ω_{NMR} az NMR frekvencia, és ω_e az elektron Larmor-frekvenciája. Ebben az esetben a spin-spin kölcsönhatás a csatolt elektronok és magok között energiaátvitelt hoz létre, amely növeli a magok polarizációját.

A cross-effektus olyan rendszerekben jön létre, ahol két különböző típusú elektron van jelen, amelyek különböző rezonanciafrekvenciákkal rendelkeznek. Az energiaátadás akkor következik be, amikor a következő feltétel teljesül:

$$\omega_{\text{ESR},1} - \omega_{\text{ESR},2} = \omega_{\text{NMR}} \quad (0.31)$$

Itt $\omega_{\text{ESR},1}$ és $\omega_{\text{ESR},2}$ az elektronok különböző rezonanciafrekvenciái. Ez a mechanizmus lehetővé teszi a hatékony energiaátadást a különböző elektronfrekvenciák között, ami jelentős mértékben növeli a nukleonok polarizációját.

A termikus keveredés akkor jön létre, amikor az elektron spinrendszer energiái széles spektrumon oszlanak el. Ebben az esetben a rendszert úgy tekinthetjük, mint amely állandó kölcsönhatásban van egy "spin-hőfürdővel", ahol az energiaátvitel folyamatos. Ennek a mechanizmusnak az alapegyenlete a következő:

$$\frac{\partial \langle \mathbf{I} \rangle}{\partial t} = -\frac{\langle \mathbf{I} \rangle - \langle \mathbf{I} \rangle_{\text{eq}}}{T_{1e}} \quad (0.32)$$

ahol $\langle \mathbf{I} \rangle$ a magspin átlagos polarizációja, $\langle \mathbf{I} \rangle_{\text{eq}}$ az egyensúlyi polarizáció, és T_{1e} az elektron-spin relaxációs idő.

Saját eredmények

A TDK dolgozatomban a PulsePol polarizációs protokoll működését vizsgáltam szimulációs módszerrel, negatívan töltött nitrogén-szubsztitúciós szénvakancia komplexeken, amelyek gyémántban helyezkednek el. A kutatás során valódi hiperfinom kölcsönhatásokat vettem figyelembe, ami lehetővé tette az eddigi közelítésekénél jóval pontosabb számítások elvégzését. Ennek köszönhetően részletesen elemezni tudtam a hiperfinom kölcsönhatás szerepét a polarizációs transzferben. Az így szerzett ismeretek alapján meghatároztam egy korrekciós tagot, amellyel sikerült javítanom a protokoll teljesítményén, szignifikáns növekedést érve el a rendszer átlagos polarizálhatóságában.

Tételesem:

- Protokoll implementálása
- Rendszerek felépítése
- Szimulációk futtatása
- Hiperfinom kölcsönhatás különféle tagjainak vizsgálata és azok szerepe polarizációra
- Polarizációs dinamika megértése után korrekció meghatározása
- Javított protokoll ellenőrzése, tesztelése

Hivatkozások

- [1] Mattias Edén. “Computer simulations in solid-state NMR. III. Powder averaging”. *Concepts in Magnetic Resonance Part A* 18A.1 (2003. jan.), 24–55. old. ISSN: 1546-6086, 1552-5023. DOI: 10.1002/cmr.a.10065. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cmr.a.10065> (elérés dátuma 2024. 02. 22.).
- [2] Mattias Edén. “Computer simulations in solid-state NMR. I. Spin dynamics theory”. *Concepts in Magnetic Resonance Part A* 17A.1 (2003. jan.), 117–154. old. ISSN: 1546-6086, 1552-5023. DOI: 10.1002/cmr.a.10061. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cmr.a.10061> (elérés dátuma 2024. 02. 22.).
- [3] Mattias Edén. “Computer simulations in solid-state NMR. II. Implementations for static and rotating samples”. *Concepts in Magnetic Resonance Part A* 18A.1 (2003. jan.), 1–23. old. ISSN: 1546-6086, 1552-5023. DOI: 10.1002/cmr.a.10064. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cmr.a.10064> (elérés dátuma 2024. 02. 22.).
- [4] Amila Ariyaratne és tsai. “Nanomechanical Sensing Using Spins in Diamond”. *Nano Letters* 16.12 (2016), 7394–7400. old. DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b04544.
- [5] Ozgur Sahin és tsai. “High field magnetometry with hyperpolarized nuclear spins”. *Nature Communications* 13.1 (2022. szept. 19.), 5486. old. ISSN: 2041-1723. DOI: 10.1038/s41467-022-32907-8. URL: <https://www.nature.com/articles/s41467-022-32907-8> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [6] Author Name. “Contributions of Quantum Effects to Physical Chemistry: A Review”. *Annual Review of Physical Chemistry* 65 (2014), 567–580. old. DOI: 10.1146/annurev-physchem-040513-103659.
- [7] L. Childress és R. Hanson. “Diamond NV centers for quantum computing and quantum networks”. *MRS Bulletin* 38.2 (2013), 134–138. old. DOI: 10.1557/mrs.2013.20. URL: <https://doi.org/10.1557/mrs.2013.20>.

- [8] J.-P. Tetienne és tsai. “Prospects for nuclear spin hyperpolarization of molecular samples using nitrogen-vacancy centers in diamond”. *Physical Review B* 103.1 (2021. jan. 21.), 14434. old. ISSN: 2469-9950, 2469-9969. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.014434. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.014434> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [9] Vladimir V. Soshenko és tsai. “Optimal Microwave Control Pulse for Nuclear Spin Polarization and Readout in Dense Nitrogen-Vacancy Ensembles in Diamond”. *physica status solidi (b)* 260.4 (2023. ápr.), 2200613. old. ISSN: 0370-1972, 1521-3951. DOI: 10.1002/pssb.202200613. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/pssb.202200613> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [10] Nino Wili és tsai. “Designing broadband pulsed dynamic nuclear polarization sequences in static solids”. *Science Advances* 8.28 (2022. júl. 15.), eabq0536. ISSN: 2375-2548. DOI: 10.1126/sciadv.abq0536. URL: <https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.abq0536> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [11] Tamiro Villazon és tsai. “Shortcuts to dynamic polarization”. *Physical Review B* 103.7 (2021. febr. 8.), 75118. old. ISSN: 2469-9950, 2469-9969. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.075118. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.075118> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [12] Rémi Blinder és tsai. $\{13\}C$ Hyperpolarization with Nitrogen-Vacancy Centers in Micro- and Nanodiamonds for Sensitive Magnetic Resonance Applications. 2024. márc. 24. arXiv: 2403.14521[cond-mat, physics:quant-ph]. URL: <http://arxiv.org/abs/2403.14521> (elérés dátuma 2024. 04. 03.).
- [13] Sanghyun Hong és tsai. “Nanoscale Magnetometry with NV Centers in Diamond”. *Nano Letters* 13.5 (2013), 2242–2247. old. DOI: 10.1021/nl401216y. URL: <https://doi.org/10.1021/nl401216y>.
- [14] A.J. Healey és tsai. “Polarization Transfer to External Nuclear Spins Using Ensembles of Nitrogen-Vacancy Centers”. *Physical Review Applied* 15.5 (2021. máj. 24.), 54052. old. ISSN: 2331-7019. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.

- 15.054052. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.15.054052> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [15] K. I. O. Ben 'Attar, D. Farfurnik és N. Bar-Gill. "Hamiltonian engineering of general two-body spin-1/2 interactions". *Physical Review Research* 2.1 (2020. jan. 17.), 13061. old. ISSN: 2643-1564. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.013061. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.013061> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [16] Akiva Feintuch Yonatan Hovav és Shimon Vega. "heoretical aspects of dynamic nuclear polarization in the solid state – The cross effect". *Journal of Magnetic Resonance* (2012). DOI: 10.1016/j.jmr.2011.09.047. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmr.2011.09.047>.
- [17] Ilai Schwartz és tsai. "Robust optical polarization of nuclear spin baths using Hamiltonian engineering of nitrogen-vacancy center quantum dynamics". *Science Advances* 4.8 (2018. aug. 3.), eaat8978. ISSN: 2375-2548. DOI: 10.1126/sciadv.aat8978. URL: <https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.aat8978> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [18] O. T. Whaites és tsai. "Hyperpolarization of nuclear spins: Polarization blockade". *Physical Review Research* 5.4 (2023. dec. 26.), 43291. old. ISSN: 2643-1564. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.5.043291. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.5.043291> (elérés dátuma 2024. 04. 03.).
- [19] D. Farfurnik, Y. Horowicz és N. Bar-Gill. "Identifying and decoupling many-body interactions in spin ensembles in diamond". *Physical Review A* 98.3 (2018. szept. 17.), 33409. old. ISSN: 2469-9926, 2469-9934. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.033409. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.98.033409> (elérés dátuma 2023. 08. 30.).
- [20] István Takács és Viktor Ivády. "Accurate hyperfine tensors for solid state quantum applications: case of the NV center in diamond". en. *Communications Physics* 7.1 (2024. jún.). Publisher: Nature Publishing Group, 1–6. old. ISSN: 2399-3650. DOI: 10.1038/s42005-024-01668-9. URL: <https://www.nature.com/articles/s42005-024-01668-9> (elérés dátuma 2024. 09. 20.).