Félvezető anyagokban mozgó elektron spin kvantumbit koherencia idejének tanulmányozása

Tudományos Diákköri Dolgozat

Készítette:

Rácz Csaba Szilárd
Fizika BSc

Témavezető:

Ivády Viktor

Budapest

2022

Kivonat

Az elmúlt évtizedekben a kvantumszámítástechnika területére jelentős figyelem irányult, amely alól ezen TDK dolgozat sem kivétel. A kontrollálható és koherens kvantumbitek fizikai megvalósítására számos megoldás látott napvilágot ezidáig, melyekbe fektetett tudományos erőfeszítések fogják ezen gyümölcsöző terület termő földjét adni. Ezek közé tartoznak az olyan kvantumbitek, amelyek nem helyhezkötöttek, hanem mozognak, ezáltál úgynevezett repülő kvantumbiteket hozva létre, melyek várhatóan fontos szerepet fognak betölteni a térben elkülönülő kvantumos rendszerek összekapcsolásában. Munkánkban, félvezetők vékony rétegeiben kialakított kvantumpöttyökbe helyezett és azokon keresztül mozgó elektron spinnek koherencia idejét vizsgáltam. A TDK munkám során kifejlesztett és implementált szimulációs eljárás segítségével modelleztem az elektron spin magspinekkel való hiperfinom kölcsönhatást és az ebből következő dekoherencia jelenségét. A koherencia időt a magsűrűség és a külső mágneses tér függvényében vizsgáltam. Az eredményeinket kísérleti cikkekben foglalt mérések eredményeivel vetettük össze. Azt tapasztaltam, hogy az elektron sebességének növelésével, a spin koherencia ideje is növekszik. Eredményeimmel egy lépéssel közelebb kerülhetünk a skálázható kvantum számítógépek megépítéséhez.

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a 2022-2.1.1-NL-2022-00004 számú projekt finanszírozásában valósult meg.

Köszönöm Ivády Viktor témavezetőmnek, a kitartó támogatásáért és iránymutatásáért. Hálával tartozok Udvarnoki Zoltán kutatónak önzetlen segítségéért, amit a kvantumszámítástechnika iránti érdeklődésem hajnalán nyújtott.

Tiszta szívvel köszönöm családomnak a gondoskodást, kedvesemnek türelmét és odaadó támogatását, valamint külön meg kell köszönnöm sógornőmnek aki közvetlen segítséget nyújtott grafikusi munkájával.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés és motiváció **4**

2. Háttérismeretek **8**

2.1. Kvantumbitek ismertetése 8

2.2. Sűrűségmátrix 9

2.3. Spin kubitek 10

2.4. A hiperfinom kölcsönhatás elmélete 12

2.5. HFK elektronra egy szilícium gazdában 12

2.6. HFK egy kvantumpöttybe zárt elektronra 13

3. Saját eredmények I. – Numerikus modell **16**

3.1. Szimulációs cella és a csapdázott elektron hullámfüggvénye 16

3.2. A koherencia mögötti matematika 19

4. Saját eredmények II. - Helyhez kötött spinkubit numerikus szimulációja **24**

4.1. Statikus eset 24

4.2. Oszcilláló eset 26

5. Saját eredmények III. - Mozgó spinkubit numerikus szimulációja **29**

5.1. Több kvantumpöttyön átfutó elektron spin esete külső mágneses térrel 32

6. Saját eredmények IV. - Spin visszaverődés általánosítása mozgó spinqubitre **33**

6.1. Visszafordított elektron szimulációja 34

6.2. Eredmények 35

7. Diszkusszió **37**

1. Bevezetés és motiváció

A kvantumeszközök rohamos ütemben fejlődtek az elmúlt évtizedekben és mára már számos alkalmazási területen bizonyították a jelentőségüket, például a kvantum érzékelés, a kvantum kommunikáció, és kvantum számítástechnika területén. Szemtanúi lehettünk számos kvantumbit - izolált kvantumos kétállapotú rendszerek - kifejlesztésének. Ezek a kvantumbitek a kvantumos alkalmazások építőköveiként szolgálnak és állapotaik nagy "hűséggel" inicializálhatók, koherensen irányíthatók és mérhetők. Jól ismertek a szupravezető áramkörök, illetve fotonok által megvalósított kvantumbitek és összetett kvantumos rendszerek, azonban egyre növekvő erőfeszítések összpontosulnak félvezető anyagokban, mint például szilíciumban, gyémántban, és szilíciumkarbidban, megalkotott elemi kvantumbitek fejlesztésére is, amelyek nagyfokú integrációt kínálnak a mára az élet minden területén fellelhető és széles körben elterjedt félvezető technológiával.

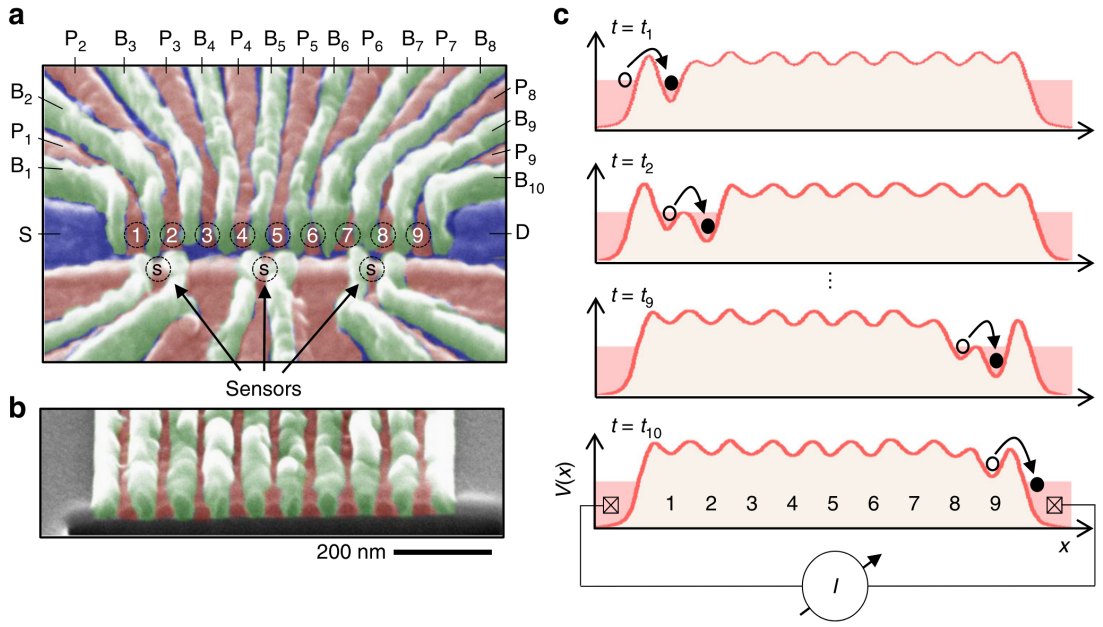
Dolgozatomban a félvezető alapú kvantumtechnológiák közül az elektronspinek által megvalósított kvantumos rendszerekkel foglalkozok. Ez a kutatási terület az elmúlt évek erőfeszítéseinek köszönhetően a kvantumszámítógépek egy vonzó megvalósítási alternatíváját nyújtja. Az elektron spin kubitek fejlesztése két irányzatra bontható attól függően, hogy kvantumbitet megvalósító elektronállapot milyen mértékben lokalizált, illetve hogy mekkora az energiaszintek közti felhasadás. Az elektronlokalizáció mértéke függ a csapdázó potenciál mélységétől. Ponthiba kvantumbitek esetén a csapdázó potenciált egy, a félvezető anyag rácsszerkezetében előforduló szerkezeti hiba okozza, amely az atommagok potenciáljával összemérhető erősségű potenciálgödröt hoz létre. A csapdázott elektron állapotai nagy energiás gerjesztésekkel, tipikusan a látható fény hullámhossz tartományába eső fénnyel manipulálhatók, míg a spin állapotai mikrohullámú gerjesztéssel kontrollálhatóak.

A félvezetőbeli spinkubitek egy, másik jelentős megvalósítási metódusa, hogy mesterségesen, kvantum völgyek és elektródák segítségével hoznak létre potenciálgödröket, amelyek magukba zárnak kvantált elektronállapotokat. Az így megvalósított rendszereket szokás kvantumpöttyöknek nevezni. A kvantumpöttyökben csapdázott elektronállapotok elektromos pulzusokkal kontrollálhatók, ami az inicia-

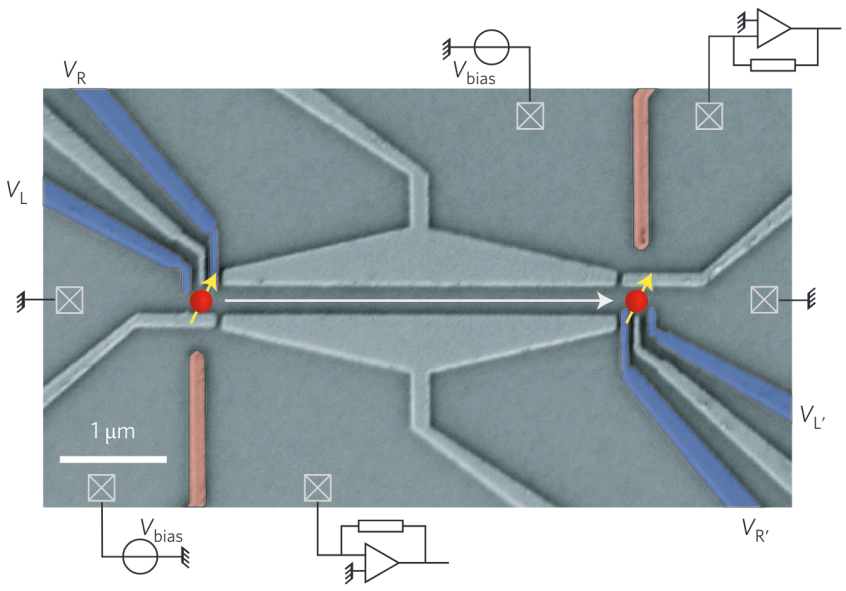
lizáció és kiolvasás szempontjából egy technológiai előnyt jelent a korábban tárgyalt ponthiba alapú kvantumos eszközökkel szemben. A sekély csapdázó potenciál és az energiaszintek csekély mértékű felhasadása azonban relatíve alacsony hőmérsékletekre korlátozza az alkalmazásokat.[1, 2]

A mesterséges potenciálokba csapdázott elektronspinek egy figyelemreméltó, új lehetőséget nyújtanak, nagyobb léptékű kvantumos rendszerek megvalósítására. A mai kvantumszámítógép architektúrák jelentős mértékben korlátozottak a "felskálázás" problémája miatt, miszerint a kvantumbitek N számának növelésével, a teljes rendszer hely, illetve erőforrás igénye nem lineárisan növekszik, hanem az N egy bizonyos $n > 1$ hatványával (N^n). Ez a probléma sok esetben visszavezethető azokra a kikötésekre, hogy a kubiteket egyedi módon kell kontrollálni, illetve hogy a kubiteknek közel kell egymáshoz lenniük, hogy több kubites kvantumkapuk megvalósíthatóak legyenek. A "helyhiány" problémája feloldható úgynevezett "repülő" vagy mozgó kvantumbitek segítségével, amelyek kvantumos információt tudnak szállítani helyváltoztató mozgásuk során két kvantumos alrendszer között. A mesterséges potenciálokban becsapdázott spin kubitek nemcsak helyhez kötötteket, hanem mozgó kvantumbiteket is képesek megvalósítani, amelyet számos az elmúlt néhány évben megjelent publikáció is demonstrált már a valóságban [3, 4, 5, 6]. Az 1. és 2. ábrán két mozgó elektronspin kubitet megvalósító kísérleti elrendezés látható.

Napjainkban a skálázhatóság problémája mellett a koherencia elvesztése, vagy röviden a dekoherencia, a kvantumszámítógépek egy másik fontos korlátozó tényezője. Bizonyított tény, hogy félvezető kvantumbitek esetén a dekoherencia fő forrásai az anyag rácsszerkezetében található más elektronspinek, illetve magspinek. A kvantumpöttyökben csapdázott elektron állapotok akár több százezer rácshelyt is magában foglaló mértékben terjednek ki, amelyből az következik, hogy az elektronspin kubitek több, magspinnel is kölcsönhatnak egyidejűleg. A mozgó kvantumbitek esetén ez a szám megsokszorozódik, hiszen az elektron a mozgása során újabb és újabb magspinekkel fog kölcsönhatni. Felmerülhet a jogos kérdés, hogy vajon van-e értelme az elektron spint mozgatni a félvezető anyagokban, hiszen a kölcsönhatásban résztvevő magspinek számának növelésével a dekoherencia jelenségének a felerősödését várhatnánk.



1. ábra. Töltéstranszfer szilíciumban. a) Az eszköz SEM képe, amely egy 9 kvantumpöttyből álló lineáris sor. b) Si hordozóra gyártott átfedő Al kapuk döntött szögű keresztmetszeti SEM képe. c) A töltésmozgatási szekvencia illusztrációja, amely a $V(x)$ kvantumpöttyök csapdázó potenciálját mutatja 4 különböző időpontban a mozgató szekvencia alatt. [3]



2. ábra. Pásztázó elektronmikroszkópos képe egy spintranszfer eszköznek, amit GaAs/AlGaAs heterostruktúra felhasználásával állítottak elő molekuláris nyaláb epitaxiával, kétdimenziós elektrongázzal (2DEG) 100 nm-rel a felszín alatt. [5]

Tudományos diákköri kutatómunkám során ezt a kérdéskört jártam körül és demonstráltam a várakozások ellentettjét, azaz hogy az elektron spineket nem érdemes "helyhezkötni", hanem inkább mozgatni kell az anyagban. Irodalmazásaim során ezt a megállapítást alátámasztó kísérletiméréseket is találtam, lásd [4] hivatkozás.

A kutatásómunkám során egy hatékony szimulációs módszert implementáltam, aminek a segítségével akár többtízezer magspin hatását is figyelembe tudtuk venni kvantumpöttyökben csapdázott elektron spinek esetén. Elsőként megvizsgáltam az egy kvantumpöttyre lokalizált elektronspin kubit koherencia tulajdonságait, annak mágneses tér, valamint magspin előfordulási gyakoriság függését. A szimulációk során kapott koherencia görbék jó egyezést mutatnak a kísérletekkel. Továbbá, az illesztésekből kapott T_2^* koherencia idő számszerűleg is egyezik a kísérleti értékekkel. Ezt követően tanulmányoztam a koherencia függvény alakulását mozgó spin kubitek esetén. Azt a fontos felfedezést tettem, hogy az eredetileg Gauss burkoló görbe szerint lecsengő koherenciafüggvény megváltozik a mozgó spinqubit esetén, és egy nyújtott exponenciális görbe szerinti lecsengést mutat. A kitevő annál kisebb, azaz a lecsengés annál elnyújtottabb, minél gyorsabban mozgott az elektronspin a rácsban. Eredményeim szerint a koherencia idő meghosszabbítható az elektron mozgatásával. Végezetül, hogy a koherenciát tovább lehessen növelni, általánosítottam a spin visszaverődés jelenségét mozgó qubitekre is.

A dolgozat felépítése a következőképp alakul. A második fejezetben ismertetem a TDK munkám során elsajátított, a kötelező tananyagon túlmutató ismeretanyagot, amely szűkséges a dolgozat megértéséhez. A harmadik fejezetben a számítási módszert valamint a szimulációs eljárás részleteit ismertetem. A negyedik és ötödik fejezetben rendre a helyhezkötött és a mozgó spin qubit koherenciáját tanulmányozom. A hatodik fejezetben a spin visszaverődés általánosításával kapcsolatos eredményeim mutatom be. Végezetül az eredmények diszkussziójával és a felhasznált irodalom listázásával zárom a dolgozatom.

2. Háttérismeretek

2.1. Kvantumbitek ismertetése

A kvantumbitek megértéséhez röviden el kell mondani, hogy miként viselkedik egy klasszikus bit. A bitek bináris rendszerben léteznek, melynek bázisa a 0 és 1. Ennek megfelelően mikor megmérjük egy bit állapotát az vagy 0, vagy 1.

Ehhez képest a kvantumbitek, kvantumrendszerek részei és egy kétdimenziós $\mathcal{H}$ Hilbert téren léteznek, ahol azon értelmezett vektorok írják le a kubit állapotát. A kvantumbitek kvantummechanikai objektumok, leírásukat absztrakt matematikai módszerekkel lehet elvégezni. A Hilbert téren felvett vektorok jelölése a következő:

$$|\psi\rangle,$$

ahol ψ csak egy megnevezése az adott vektornak (más karakter is használható de preferáltak az egyszerűbbek mint a ψ vagy a ϕ). A $|\cdot\rangle$ jelölést Dirac-jelölésnek nevezzük és egy vektort jelöl a Hilbert téren.

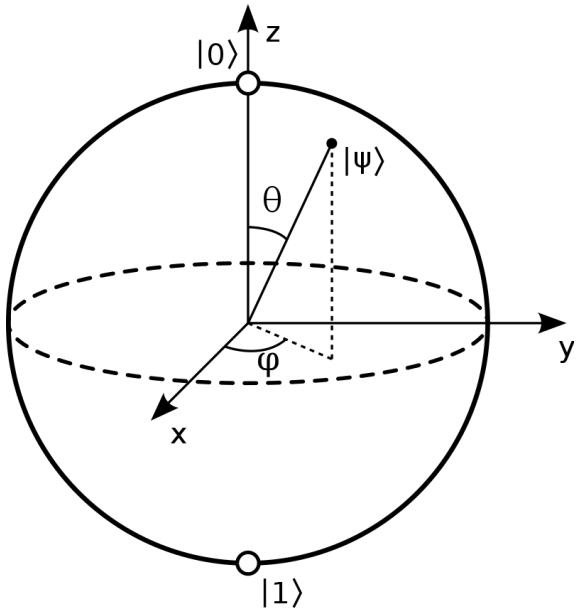
Csak úgy, mint kalsszikus bitek esetén, a kubiteknek is vannak bázisai. Ezeket a Dirac-jelöléssel a következőképpen írhatjuk fel:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ahogy azt láthatjuk, a kubitek 0 és 1 állapotának megfelelője ezen két vektor a $|0\rangle$ és az $|1\rangle$. Azonban ha csak ennyiről lenne szó, nem lenne semmi érdekesebb különbség a kvantum és a klasszikus bitek között. A kvantumbitek nem csak ezen két állapotban létezhetnek. Amíg nem végzünk mérést rajtuk, végtelen számú másik állapotban lehetnek. Ezt a kvantum szuperpozícónak nevezett tulajdonságuk biztosítja. Azonban, amint elvégezzük a mérést, összeomlik a szuperpozíció és beállnak valamely bázisba miután már klasszikus bithez hasonlóan két értéket vehetnek fel.

A kvantumbit állapotainak szemléltetésére, a Bloch-gömb használatos:



3. ábra. Az ábrába berajzolt $|\Psi\rangle$ állapot egy példa, a nem bázisban levő állapotokról. Ha egy kvantumbitet szuperpozícióba helyezünk, például egy Hadamard operátorral, az állapotát jelölő vektor a Bloch-gömb felületén a pólusoktól eltérő pontok valamelyikére fog mutatni.

2.2. Sűrűségmátrix

Az imént tárgyalt állapotvektorok azonban több kvantumállapotot magába foglaló rendszer esetén megnehezítik a számolásokat. Ezért használunk egy egyszerre több állapotot is leírni képes struktúrát, az állapotokból összeállított sűrűségmátrixot. Ezek kényelmes eszközei komplexebb rendszerek leírásának, melyek nem teljesen ismertek. Az egyszerű megértésért elősször bemutatok egy tiszta állapot sűrűségmátrixát:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|,$$

ahol a sűrűségmátrix a ψ állapot önmagával vett diadikus szorzataként adódik.

Most nézzük meg, hogyan írjuk fel több állapotra. Például vegyünk egy olyan rendszert mely i darab állapotban lehet. Minden $|\psi_i\rangle$ állapothoz egy p_i valószínűség tartozik (itt i indexként van értelmezve). Ezekhez tartozó sűrűségmátrixot a következőképp definiáljuk:

$$\rho = \sum_i p_i \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \tag{1}$$

Az így számolt sűrűségmátrix elemei, magába foglalják az állapotok rendszerét, ahol ρ egy $n \times n$-es mátrix, ahol n a ψ_i vektorok hossza.

Példaként írjuk fel a $|0\rangle$ bázishoz tartozó tiszta állapotot:

$$\rho_{\text{példa}} = |0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

A sűrűségmátrixról tudni kell, hogy a főátlójában a valószínűségek sorakoznak fel, tehát ezen elemek összegének egyenlőnek kell lennie eggyel, azaz $\operatorname{Tr}\rho = 1$. A példánk esetében a $|0\rangle$ állapot egy bázisvektor. A mátrixból pedig kiolvasható, hogy annak a valószínűsége, hogy az első bázisvektorban van a rendszer az 100%, $\rho_{11} = 1$, míg a ρ_{22}=0. A már említett Hadamard operátorral létrehozott szuperpozícióban lévő állapotvektorok esetén, a $\rho_{11} = \rho_{22} = 0.5$. Ilyenkor is igaz hogy a $\operatorname{Tr}\rho = 1$. A sűrűségmátrix offdiagonális elemei leírják az állapotok szuperpozícióját illetve több kubit esetén az összefonódását. A rendszer koherenciáját a sűrűségmátrix offdiagonális elemeinek nagyságából lehet meghatározni.

Tekintsünk egy általános 2×2-es sűrűségmátrixot:

$$\rho_2 = \begin{pmatrix} a & c \\ c^* & b \end{pmatrix}.$$

Itt a c tag egy komplex szám, ami leírja a koherenciát. Ha a valós és imaginárius részét a Bloch gömbön ábrázoljuk, azok a Bloch vektor elemei rendre a következőképp alakulnak:

$$\operatorname{Re} c \to x$$

$$\operatorname{Im} c \to y$$

A koherencia meghatározása a munkám egy kulcsfontosságú része, melyet a 3.2 alfejezetben részletesen kifejtek.

2.3. Spin kubitek

Kétállapotú rendszereket alkotnak a félvezetőkben lévő lokalizált elektronspinek is, melyek alkalmasak kvantumbiteket létrehozni. Ezek a spinek azonban kölcsönhatnak a félvezető anyag rácsában fellelhető magspinekkel, és ezért időben változhatnak.

Ezt a kölcsönhatást nevezzük hiperfinom kölcsönhatásnak. Egy spint koherensnek nevezünk, ha jól definiált fázisa van. Ha például ilyen "spinfürdőbe" behelyezünk egy elektron spint, az valamilyen T_2^* idő alatt a magspinek hatására valamilyen ismeretlen fáziseltolódást szenved, ami dekoherenciát okoz.

Azt tapasztalták[7], hogy ez a dekoherencia idő más-más anyagok esetén különböző nagyságú. A szilícium ebből a szempontból előnyösnek bizonyult, mivel a magspinnel rendelkező 29-es izotópja alacsony előfordulási valószínűségének köszönhetően hosszú elektronspin koherencia időt eredményez, lásd 1 táblázat, ezzel pedig lehetővé teszi hibatűrő spin kubit műveletek megvalósítását. Szerencsére a szilícium feldolgozása, a klasszikus felhasználási módjainak köszönhetően már kellően fejlett ahhoz, hogy kvantumpöttyöket gyártsunk belőlük.

Minta	$\mathcal{N}_\mathcal{T}$	$\mathcal{N}_\mathcal{S}$	$\mathcal{A}$	T_2^*
GaAs	10^6	10^6	$3.6\,T$	$7.2\,ns$
Természetes Si	10^5	5000	$1.85\,mT$	$0.22\,\mu s$
100% ^{29}Si	10^5	10^5	$37\,mT$	$49\,ns$
0.01% ^{29}Si	10^5	10	$3.7\,\mu T$	$4.9\,\mu s$

1. táblázat. Koherenciaidő különböző félvezető anyagok esetén. Az utolsó három sorban a szilícium különböző százalékban jelen levő kölcsönható magspin sokaság esetét láthatjuk. $\mathcal{N}_\mathcal{T}$ a kvantumpöttyön belüli magok teljes száma, $\mathcal{N}_\mathcal{S}$ a nem zéró spinű magok száma, $\mathcal{A}$ a maximális Overhauser-tér értéke, amikor a spinek mind egy irányba állnak és T_2^* a mért dekoherencia idő. Ezt a szakirodalomban "Free Induction Decay"-nek nevezik. Láthatjuk, hogy a tisztított szilícium nyújtja a legelőnyösebb opciót.

Félvezető beli spin kvantumbitek esetén az Overhauser-tér értéke jellemzően nem nulla, hiszen egy-egy időpillanatban a magspinek véletlenszerűen állnak. Azonban, ha feltételezzük a spinek polarizáltságát, vagyis azt hogy $50-50\%$ hogy fel vagy le állnak, akkor ez a mező zérus. Ezt beláthatjuk, ha végtelenben vizsgáljuk meg az időátlagát egy magspinekből álló rendszernek. A dolgozatom készítésekor ilyen, polarizálatlan spinekkel dolgoztam.

2.4. A hiperfinom kölcsönhatás elmélete

A hiperfinom kölcsönhatás (HFK) a dolgozatban vizsgált rendszerek esetén a dekoherencia fő forrása. A HFK Hamilton-operátorának általános formulája a következő:

$$H_{HF} = SAI, \tag{2}$$

ahol a Hamilton-operátor egyenlő az A HFK tenzor, az I magspin- és az S elektronspin-operátor vektorok szorzatával. Egy R_I pozícióban lévő atommag HFK tenzorkomponensei, egy izotropikus és egy anizotrópikus kifejezéssel írhatók fel. Az első lesz az a, mely a Fermi-kontaktus névre hallgat. A másodikat b_{ij}-vel jelölöm a dolgozatban, amely egy dipoláris nyommentes tenzor, melyben az i és a j index a silicon lapcentrált köbös rácsban felvett x, y, z koordinátákra hivatkoznak.

Első elvű számolások megmutatták[7], hogy a szilícium vezetési sávéljére helyezett elektron spin A hiperfinom tenzortát teljesen meghatározza a és b skalár hiperfinom paraméter, melyek megkaphatók a spinsűrűségből [7]:

$$\rho_S(\mathbf{r}) = \rho_\uparrow(\mathbf{r}) - \rho_\downarrow(\mathbf{r}).$$

Egy elektron esetén a spin sűrűség megegyezik a hullámfüggvény abszolút érték négyzetével. A [7] referenciában található cikk eredményei alapján a magok helyén vett hiperfinom kölcsönhatásban főkként az a Fermi-kontaktus tag jelenik meg, a dipól-dipól tag elhanyagolható.

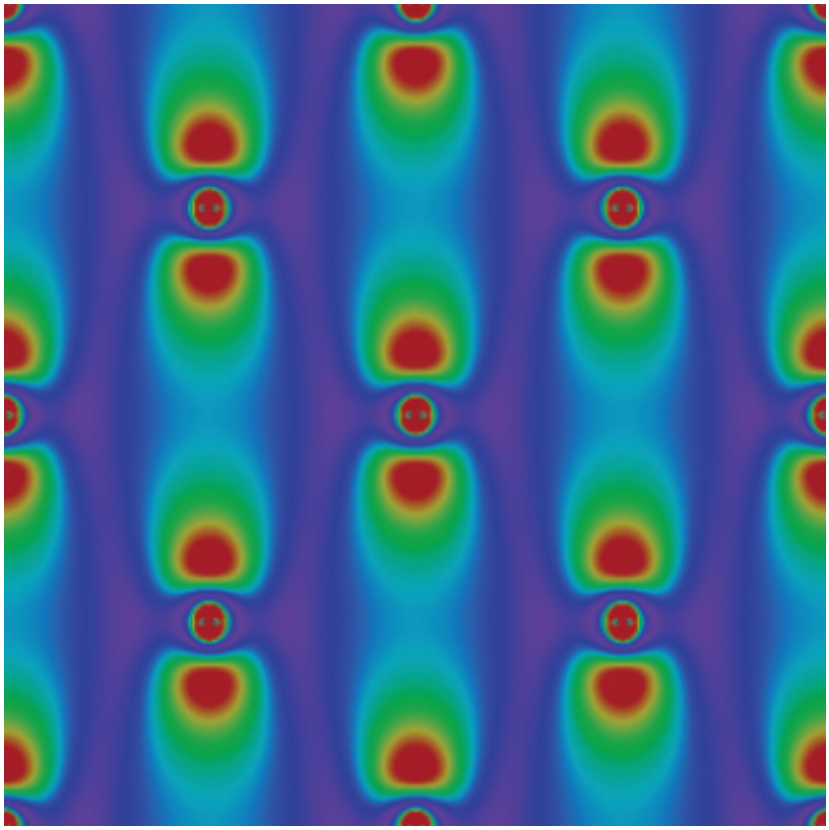
A spin flip-flop kölcsönhatásokat elhanyagolva, amely egy jó közelítés nem nulla mágnese tér estén, az R_I helyen található magspin HFK Hamiltonija az alábbi alakban írható fel

$$H_{HF}(R_I) = a(R_I) S_z I_z, \tag{3}$$

ahol S_z és I_z az elektron és a magspin z operátora, melyek közt tenzoriális szorzat jelenik meg.

2.5. HFK elektronra egy szilícium gazdában

A 4. ábra mutatja a spin sűrűséget egy 8 atomos negatívan töltött szilícium szupercellára kiszámítva, ahol az extra elektron a vezetési sáv peremén van tartva. Figyeljük



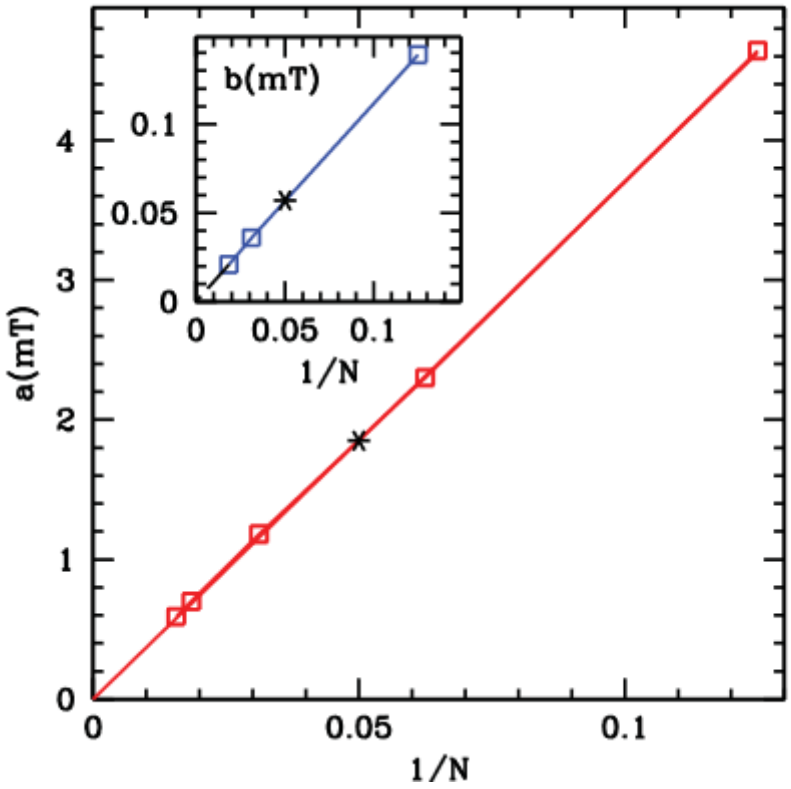
4. ábra. Elektron spin sűrűség ábrázolása Si rétegben.[7] A függőleges irány a z tengelynek felel meg, a színek pedig pirostól (magas spinsűrűség) liláig (alacsony spinsűrűség) fut. A köralakú magas spinsűrűségű területek a szilícium atomok helyei.

meg az eloszlás anizotrópiáját, mely megnyúlik a z tengely irányában. Az 5. ábra összefoglalja a 29-es szilíciumra számolt hiperfinomkölcsönhatást $1/N$ függvényében, amely most sűrűséget helyettesíti, ábrázolva a negatív töltésű szupercellában. [7] Az illesztett görbe segítségével meghatározhatjuk az a Fermi-kontaktus hiperfinom paraméter értéket tetszőleget spinsűrűség esetén, lásd alább.

2.6. HFK egy kvantumpöttybe zárt elektronra

Most vizsgáljunk meg egy kvantumpöttybe zárt elektronra vonatkozó hiperfinom kölcsönhatást. A teljes spin sűrűség (normalizálva az egész térben) egy kvantumpöttyben a következő:

$$\rho_S^{\mathrm{KP}}(r) = |F(r)|^2 \, \Omega_{\mathrm{PC}} \, \rho_S^{\mathrm{PC}}(r) \tag{4}$$



5. ábra. A négyzetek adják a számított hiperfinom paramétereket $1/N$ függvényében, ahol N a szupercellában lévő Si atomok száma. Az egyenesek $a_N = (37/N)\,mT$ (piros) és $b_N = (1.1/N)\,mT$ (kék), jól illeszkednek a pontokra. [7]

ahol KP a kvantumpöttyre utal, PC az Si primitív cellájára, $\Omega_{\rm PC}$ pedig ezen primitív cellának térfogatával egyezik meg. $F(r)$ egy lassan változó, egyre normált burkológörbe függvénye. Lényegében ez egyenlő, egy V térfogatú szupercellára az egyenletes burkológörbe függvénnyel $(1/\sqrt{V})$ és a PC-ben normalizált spin sűrűséggel. A kvantumpöttyben R_I helyen lévő magspin által okozott hiperfinom kölcsönhatás az említett közelítésekkel megegyezik a fermi kontaktussal ami a következő:

$$a(R_I) = a_2 |F(R_I)|^2\, \Omega_{\rm PC} \tag{5}$$

ahol a_2 a szupercellára végzett számolásokból extrapolált érték, alkalmazva a primitív cellára, amibe $N = 2$. Ha van egy olyan kvantumpöttyünk, ahol minden atommagnak van egy spinje és a magspinek teljesen polarizáltan helyezkednek el, akkor a HF kölcsöntatásból származó $\mathcal{A}$ Overhauser téret az egész KP-re vonatkozó

összegből számolhatjuk:

$$\mathcal{A} = \sum_{R_i \in \mathrm{KP}} a(R_I) = 2a_2 \tag{6}$$

Több anyagra is ki lehet számolni $\mathcal{A}$-t, aminek eredményeiről az 1. táblázat számolt be.

3. Saját eredmények I. – Numerikus modell

3.1. Szimulációs cella és a csapdázott elektron hullámfüggvénye

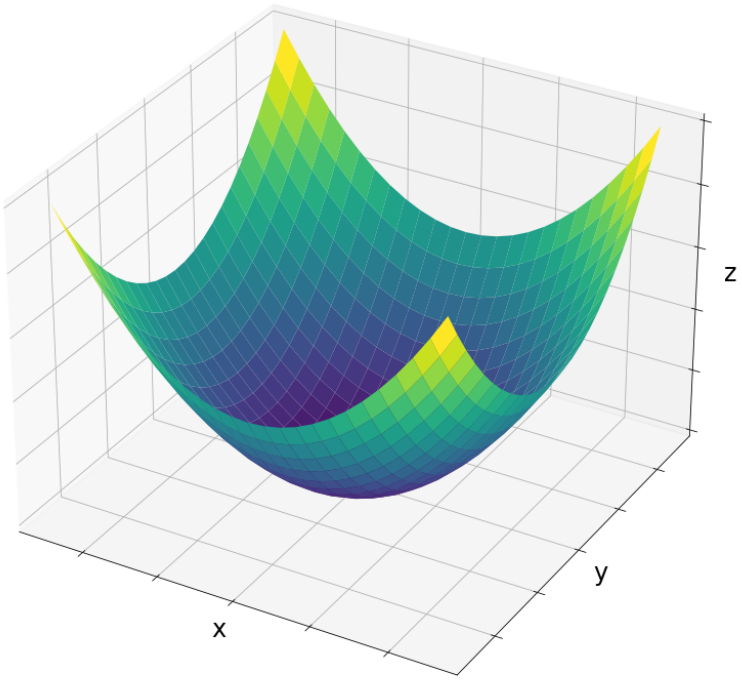
A szimulációk során definiáltam egy adott méretű szimulációs cellát. Ezt fizikailag egy potenciál gödörként kell értelmezni, melynek méreteit a belehelyezett, vagy másképp fogalmazva, a csapdázott elektron hullámfüggvényének kiterjedésének segítségével definiáltam. Ez a potenciálgödör (6. ábra) lesz a kvantumpöttyünk, amit z irányba végtelen mély potenciálgödörnek vettem, ezzel modellezve egy L_z széleségű kvantum völgyet, míg x és y irányban pedig parabolikusan változó potenciált tételeztem fel, amelyekkel a csapdázó elektródák potenciálját modelleztem. x irányban a potenciál:

$$U(x) = \frac{1}{2}\, m\, \omega_x^2\, x^2, \tag{7}$$

ahol

$$\omega_x = \frac{\hbar}{m\, \sigma_x^2}. \tag{8}$$

A 8. egyenletben σ_x egy általam megadott paraméter, mely x és y irányba is 10 nanométer, $\hbar$ a redukált Planck-konstans, m pedig az elektron tömege. $\sigma_x = 10$ nm azt jelenti, hogy a csapdázott elektron x irányú kiterjedése körülbelül $4\sigma_x = 40$ nm alapállapotban, ami összhangban áll a szilíciumban megvalósított kvantumpöttyök paramétereivel.



6. ábra. A fentebb jellemzett potenciálgödör xy sikbeli potenciáljának 3 dimenziós szemléltetése.

A szimulációs terünket leíró három paramétert L_z L_x és L_y -al jelöljük. Itt L_z a már korábban említett potenciál völgy z irányú szélessége, amit 2 nanométernek vettem. A másik két irányban pedig az iránynak megfelelő σ érték hatszorosát adtam meg, azaz például x irányra: $L_x = 6\sigma_x$. Egy ilyen szelességű szimulációs doboz éppen megfelelően ahhoz, hogy egy σ_x-szel jellemzett potenciálgödörben csapdázott elektron alapállapotát magában foglalja. Összegezve tehát:

$$\begin{aligned} L_x &= 60 \text{ nm}, \\ L_y &= 60 \text{ nm}, \\ L_z &= 2 \text{ nm}. \end{aligned} \tag{9}$$

Ezek lesznek a szimulációs cellánk méretei. Az ebben létrehozott potenciálgödörben csapdázott elektron energiáját a három irányba külön-külön határoztam meg, majd

az összegüket vettem.

$$
\begin{aligned}
E_{x\,n} &= \hbar\,\omega_x\,(n+0.5),\\
E_{y\,n} &= \hbar\,\omega_y\,(n+0.5),\\
E_{z\,n} &= \frac{1}{2\,m}\left(\frac{n\,\pi}{L_z}\right)^2,\\
&\Downarrow\\
E &= E_{x\,n} + E_{y\,n} + E_{z\,n}.
\end{aligned}
\tag{10}
$$

Az elektron állapotát leíró Φ hullámfüggvényt a különböző irányokba felt parciális hullámfüggvények szorzata adja:

$$
\begin{aligned}
\Phi_{n\,x} &= \frac{1}{\sqrt{2^n\,x!}}\cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\,\omega_x}{\hbar}}\,x\right)\cdot e^{-\frac{m\,\omega_x\,x^2}{2\,\hbar}}\cdot\left(\frac{m\,\omega_x}{\pi\,\hbar}\right)^{\frac{1}{4}},\\
\Phi_{n\,y} &= \frac{1}{\sqrt{2^n\,y!}}\cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\,\omega_y}{\hbar}}\,x\right)\cdot e^{-\frac{m\,\omega_y\,y^2}{2\,\hbar}}\left(\frac{m\,\omega_y}{\pi\,\hbar}\right)^{\frac{1}{4}},\\
\Phi_{n\,z} &= \sqrt{\frac{2}{L_z}}\cdot\cos\left(\frac{n\,\pi\,z}{L_z}\right),\\
&\Downarrow\\
\Phi &= \Phi_{n\,x}\cdot\Phi_{n\,y}\cdot\Phi_{n\,z},
\end{aligned}
\tag{11}
$$

ahol H_n az n. hermitikus polinom. Ezen Φ segítségével felírhatjuk a spin sűrűséget, ha a konjugáltjával megszorozzuk önmagát. Ezzel a ρ_{spin} sűrűséggel fognak majd a magspinek kölcsönhatni, azaz most az elektron töltéssűrűségével,

$$
\rho_{\text{spin}} = \Phi^*\Phi = |F|,
\tag{12}
$$

ahol $|F|$ az 5. egyenletben a hiperfinom kölcsönhatás meghatározásánál használt egyre normált burkoló görbe.

Most hogy ezt ismerjük, nézzük meg hogy mennyi magspinnel is dolgozunk. A szilícium magok sűrűsége a rendszerben

$$
N_{\text{Si}} = 50\ \text{nm}^{-3}.
$$

Ezalapján a szimulációs cellába helyezett atomok számát a következőképpen kaphatjuk meg:

$$
N_{\text{atom}} = N_{\text{Si}}\cdot L_x\cdot L_y\cdot L_z
\tag{13}
$$

Ezek még csak az atomok száma, nem pedig a kölcsönható magspineké, amelyet $N_{\text{spin}} = c_{^{29}\text{Si}} N_{\text{atom}}$ ad meg, ahol $c_{^{29}\text{Si}}$ a magspinek előfordulási valószínűsége. Láthatjuk, hogy ez $c_{^{29}\text{Si}}$-től függően rengeteg (100-10000) spint jelent, melyekkel hatékonyan kell tudjunk számolni.

3.2. A koherencia mögötti matematika

N darab spinre vonatkozó koherenciát felírhatjuk a következőképpen:

$$C(t) = \text{Tr}(\sigma_+^N \, \rho_N(t)) \tag{14}$$

ahol ρ_N az N db spin sűrűségmátrixa, σ_+^N pedig az elektronspin megfelelő dimenziójú léptető operátora, melyet egyszerűen megkaphatjuk:

$$\sigma_+^N = \sigma_+ \bigotimes_{i=2}^{N} \text{I}_2,$$

ahol most mindkét operátor kétdimenziós és az I az identitás operátort jelöli, a σ_+ pedig

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

A szimulációkban az elsőrendű általánosított klaszter korrelációk kifejtési módszerének [8] (gCCE-1) egy analitikusan egyszerüsített változatát használjam.

Klaszter korrelációs kifejtésben különböző rendű koherenciák produktuma írja le a teljes rendszer koherenciájának állapotát t időpontban.[8]

$$C(t) = \prod_{i=0}^{\infty} C^i = C^0 \, C^1 \, C^2 \, ..., \tag{15}$$

ahol a különböző C^n rendek az n magspint tartalmazó kisebb alrendszerek járulékait írjak le. Ebből az elsőrendű közelítés a következő:

$$C(t) = C^0 \, C^1, \tag{16}$$

melyben a tagok az előzőek alapján:

$$\begin{aligned} C^0 &= \text{Tr}\left(\sigma_+ \, \rho_1(t)\right) \\ C^1 &= \prod_{i=1}^{\infty} \frac{C_i^1}{C^0} \\ C_i^1 &= \text{Tr}\left(\sigma_+^2 \, \rho_i^1(t)\right), \end{aligned} \tag{17}$$

ahol $\rho_i^1(t)$ az elektront és az i-ik magspint tartalmazó alrendszer sűrűség mátrixa. A rendszer időfejlődését a Hamilton-operátorát határozza meg, amely

$$H = H_e + \sum_{i=1}^{N} H_i + \sum_{i=1}^{N} H_{ei}, \tag{18}$$

ahol

$$\begin{aligned} H_e &= g_e\,\mu_B\,B_z\,S_z^0 \\ H_i &= g_{\mathrm{Si}}\,\mu_N\,B_z\,S_z^i \\ H_{ei} &= A_i\,S_z^0\,S_z^i. \end{aligned} \tag{19}$$

H_e az elektron Hamiltonja, H_i az i-edik magspinhez tartozó Hamilton operátor, H_{ei} pedig az elektron és az i-edik magspin közötti kölcsönhatás Hamiltonja. Az utóbbi a hiperfinom kölcsönhatás amelyet már korábban részleteztem. Az összeghez tartozna még egy magspin-magspin Hamilton is (például: H_{ij}) azonban a magspinek mágneses momentuma olyan alacsony, hogy a kettő közti kölcsönhatást most elhanyagolhatuk.

Az A_i hiperfinom tenzor, amit felírhatunk a fermi kontaktus $a = a(R_i)$ és egy 3×3-as identitás mátrix szorzataként,

$$A = aI_{3\times 3}$$

A nulladrendű alrendszer Hamilton opera, amely csak az elektronspint tartalmazza, az alábbi 2×2-es mátrix segítségével adható meg:

$$H_e^0 = g_e\,\mu_B\,B_z \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{20}$$

Az elsőrendű alrendszerek Hamilton opera az alábbi 4×4-es mátrixok segítségével adhatók meg:

$$H_i^1 = H_e + H_i + H_{ei} \tag{21}$$

$$H_e^1 = g_e\,\mu_B\,B_z \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = H_e \otimes \mathrm{I}_2 \tag{22}$$

$$H_i^1 = \mathrm{I}_2 \otimes H_i = g_{^{29}\mathrm{Si}}\,\mu_N\,B_z \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{23}$$

$$H_{ei}^1 = A_i\,S_z^0 \otimes \mathrm{I}_2 \cdot \mathrm{I}_2 \otimes S_z^i = A_i\,S_z \otimes S_z = A_i \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}. \tag{24}$$

Mind H_e^1,H_i^1 és H_{ei}^1 diagonális mátrixnak adódik, így az alábbi alakban irható fel:

$$H_i^1 = H_e^1 + H_i^1 + H_{ei}^1 = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d \end{pmatrix} \tag{25}$$

A Schrödinger egyenlet megoldásaként, az alrendszerek unitér propagátor-operátorát a H_i operátorok mátrix exponenciálisával írjuk fel:

$$U_i^1(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_i \cdot t} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}a \cdot t} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}b \cdot t} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}c \cdot t} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}d \cdot t} \end{pmatrix}. \tag{26}$$

Az elsőrendű alrendszerekre azt tételezzük fel, hogy a $t = 0$ időpillanatban a sűrűségmátrix szorzatalakban irható fel,

$$\rho^1(t=0) = \rho_e \otimes \rho_i, \tag{27}$$

ahol

$$\rho_e = |\psi\rangle\langle\psi| = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle\right)\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\uparrow| + \langle\downarrow|\right)\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{28}$$

$$\rho_i = \frac{\mathrm{I}_2}{2} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{29}$$

Az utóbbi sűrűségmátrix a magspinek termikus állapotát írja le. A propagátort és a kezdeti sűrűségmátrixot a koherencia kifejezésébe beírva kapjuk:

$$C_i^1 = \mathrm{Tr}(\sigma_+^1 \, \rho_i^1(t)) = \mathrm{Tr}(\sigma_+^1 \, U^1(t) \, \rho^1(t=0) \, (U^1(t))^\dagger) \tag{30}$$

Azért, hogy egy egyszerű analitikus kifejezést kapjunk a fenti egyenletre, bontsuk a 4×4-es mátrixokat a magspin állapot szerint két altérre. Egyszerűség kedvéért az i indexeket most elhagyjuk, míg a 0 alsó index a $t = 0$ sűrűségmátrixot jelöli. Fel és le nyilak jelölik a különböző magspin állapotokhoz tartozó alterek mátrixait,

$$\rho_{0\uparrow}^1 = \rho_{0\downarrow}^1 = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix} \tag{31}$$

$$\begin{aligned} U_\uparrow^1(t) &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\, a \cdot t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}\, c \cdot t} \end{pmatrix} \\ U_\downarrow^1(t) &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\, b \cdot t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}\, d \cdot t} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{32}$$

$$\begin{aligned} U_\uparrow^1(t) \, \rho_{0\uparrow}^1 \, (U_\uparrow^1(t))^\dagger &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-\frac{i(a-c)\, t}{\hbar}} \\ e^{\frac{i(a-c)\, t}{\hbar}} & 1 \end{pmatrix} = \rho_\uparrow^1(t) \\ U_\downarrow^1(t) \, \rho_{0\downarrow}^1 \, (U_\downarrow^1(t))^\dagger &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-\frac{i(b-d)\, t}{\hbar}} \\ e^{\frac{i(b-d)\, t}{\hbar}} & 1 \end{pmatrix} = \rho_\downarrow^1(t) \end{aligned} \tag{33}$$

Az eddigieket összegezve, a koherencia az alábbi alakban írható fel:

$$C_i^1 = C_{i\uparrow}^1 + C_{i\downarrow}^1 = \mathrm{Tr}\left(\sigma_+^1 \, \rho_\uparrow(t)\right) + \mathrm{Tr}\left(\sigma_+^1 \, \rho_\downarrow(t)\right) = e^{-\frac{i(a-c)\, t}{\hbar}} + e^{-\frac{i(b-d)\, t}{\hbar}} \tag{34}$$

ahol a,b,c és d függ A_i HFK értékétől. Ezen paraméterek, az elektron hullámfüggvényének ismeretében, a korábban részletezett módszer segítségével meghatározható. A koherencia a fenti képlet 16 és 17 egyenletekbe történő be helyettesítését követően egyszerűen és gyorsan számolható.

A különböző alterekben a koherencia függvény eltérő frekvenciával oszcillál az eltérő HFK miatt. A teljes koherencia az ilyen parciális koherencia függvények szorzataként áll elő, amelyet ábrázolva a koherencia fügvény lecseng egy Gaussi burkoló mentén.

Az eddigiekben részletezett módszert egy Wolfram Mathematica notebook-ban implementáltam, amely megtalálható a dolgozat végén, és a saját számítógépemen futtattam. A futtatások részleteit az eredmények részben taglalom.

4. Saját eredmények II. - Helyhez kötött spinkubit numerikus szimulációja

A következőkben bemutatom a szimulációk eredményeit és értelmezem fizikai jelentésüket. A számolás végén a a Mathematica notebook automatikusan készített ábrákat a számolt értékekről és a rájuk illesztett függvényről. Ezeken az idő függvényében láthatjuk a koherencia változását, ami természetesen csökkenő lesz. Az adatokra egy Gaussi függvényt illeszttettem,

$$C(t) = \frac{1}{2} \exp\left(\frac{-t}{T_2^*}\right)^{|n|}, \tag{35}$$

ahol T_2^* és n az illesztési paraméterek. Ezen illesztett függvény görbéjét, az ábrákon piros szaggatott vonal fogja jelölni. A számolások során öt,a modellben bevezetett paramétert változtattunk:

- Kvantumpötty száma (N_{qdot})
- Magspin sokaság ($\mathcal{N}_\mathrm{S}$)
- Mágneses tér (B)
- Szimulációs idő (t_szim)
- Mintavételezési idő (Δt)

Ezek közül az első három lesz a legfontosabb a jelenségek bemutatásakor.

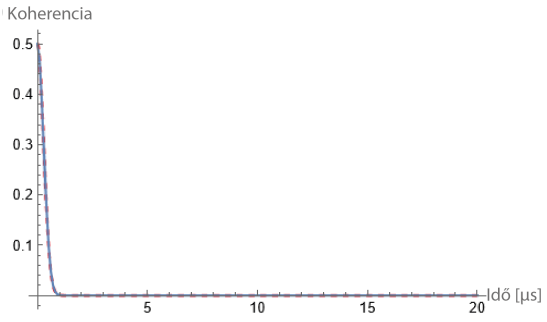
Az egyszerűség kedvéért a szimulációkban azt a közelítést alkalmaztuk, hogy a csapdázott elektron mindig az alapállapotban található meg 1 valószínűséggel. Valós rendszerben ez a közelítés nem feltétlenül igaz a véges hőmérséklet, illetve az elektron esetleges mozgatása miatt. Mindazonáltal, az eredményeimet kvalitatívan helyesnek gondoljuk, és várakozásaink szerint a demonstrálni kívánt jelenség lényegi részét helyesen leírja le.

4.1. Statikus eset

Ebben a szimulációs sorozatban a magspin sokaság, más szóval a magspinek előfordulási gyakoriságának változását vizsgáltam, vagyis azt, hogy az $\mathcal{N}_\mathrm{S}$ paraméter

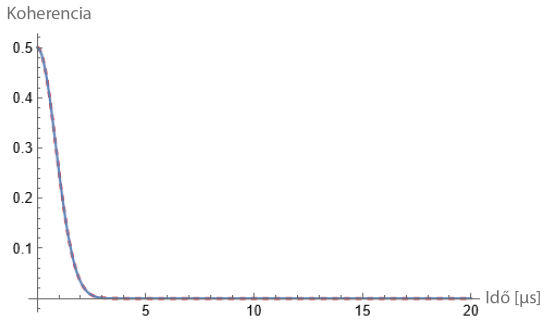
függvényében, hogyan alakul az elektron koherenciája. Ehhez a következő paramétereket állandónak állítottam be:

- $N_{qdot} = 1$
- $B = 0\,mT$



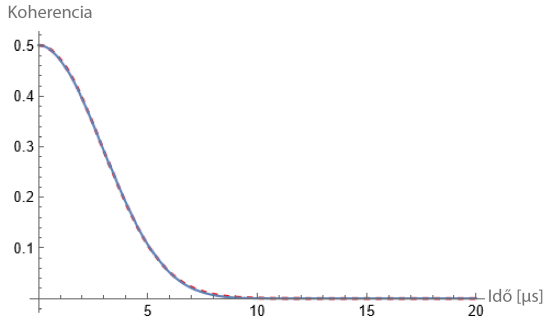
(a) $\mathcal{N}_S = 0.05$

$T_2^* = 0.3911\,\mu s$ $n = 2.0008$



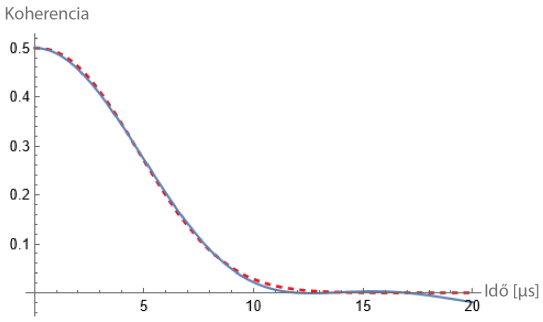
(b) $\mathcal{N}_S = 0.005$

$T_2^* = 1.2164\,\mu s$ $n = 2.0079$



(c) $\mathcal{N}_S = 0.0005$

$T_2^* = 4.0384\,\mu s$ $n = 2.0615$



(d) $\mathcal{N}_S = 0.0002$

$T_2^* = 6.2193\,\mu s$ $n = 2.2235$

7. ábra. A szimuláció eredménye négy különböző magspin gyakoriság $\mathcal{N}_S$ esetén és az illesztett függvény paraméterei.

Ahogyan azt várhattuk, az ábrákról leolvasható, hogy kevesebb kölcsönható magspin hosszabb koherencia időt eredményez, valamint azt is, hogy az illesztés igen pontos. Észrevehetjük az utolsó ábrán, hogy miután már lecsengett nullába a görbe, ismét mozgásba kezd. Azt tapasztaljuk, hogy $\mathcal{N}_S = 0.0005$ esetén még szépen lecseng (7c) de $\mathcal{N}_S = 0.0002$ -nél már koherens oszcillációba kezd. Ez azért van mert ennél a gyakoriságnál már csak néhány magspinnel hat kölcsön az elektron spin, ami nem elég ahhoz, hogy koherenciát végérvényesen elveszítsük.

Az illesztett T_2^* paramétereket a spin gyakoriság függvényében logaritmikus skálán ábrázolva (8. ábra) egy egyenest kapunk. Erre az adatsorra a következő függvényt illesztettem:

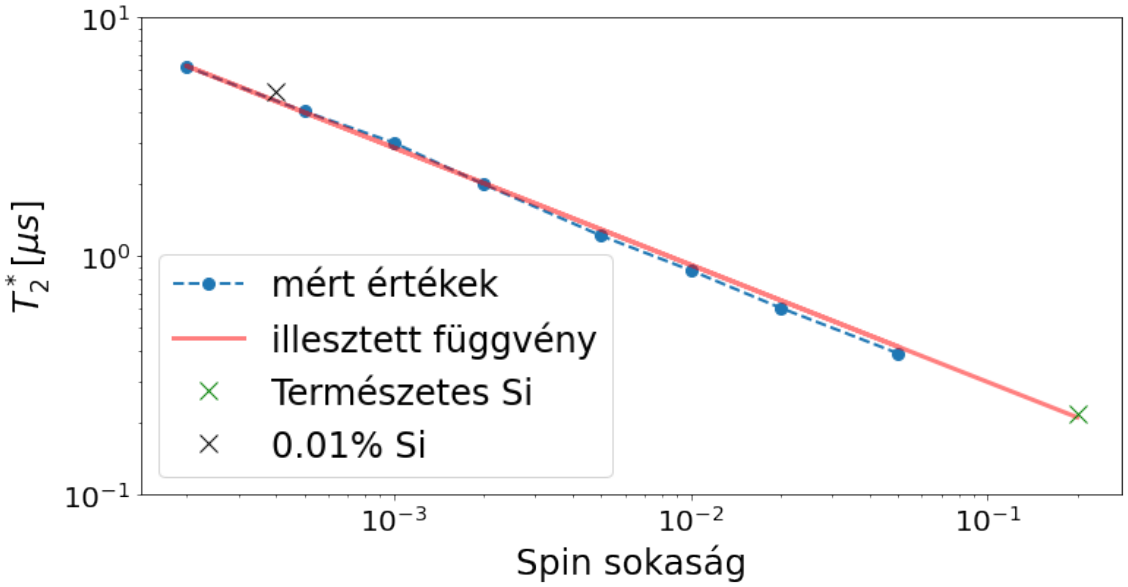
$$T_2^* = \frac{a}{\mathcal{N}_S{}^b} \tag{36}$$

Melyből az a és b paraméterek az illesztést követően a következők lettek:

$$a = 0.096 \pm 0.007$$

$$b = 0.491 \pm 0.009$$

Tehát a koherencia idő a spin gyakoriság reciprok gyökével aranyosan változik kvantum pöttyök esetén. Korábbi eredményekkel összevetve remek egyezést kapunk (a kvantumpötty potenciál önkényesen választott paraméterei ellenére), lásd 8. ábra.



8. ábra. Koherencia idő a $\mathcal{N}_S$ függvényében. A két kereszt mérési eredményekből származó értékek. Láthatjuk, hogy a szimulációnk jól megközelíti a gyakorlatban kinyert eredményeket.[7]

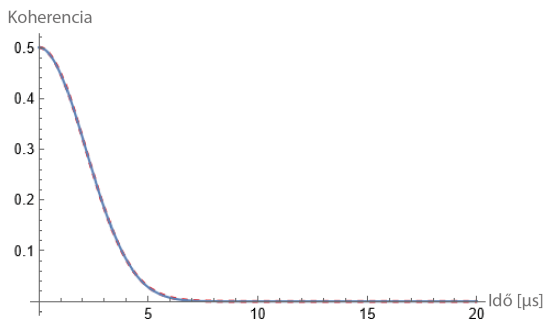
4.2. Oszcilláló eset

Ebben a szimulációs sorozatban a mágneses tér változását vizsgáltam a következő, állandónak beállított paraméterek mellett:

- $N_{qdot} = 1$

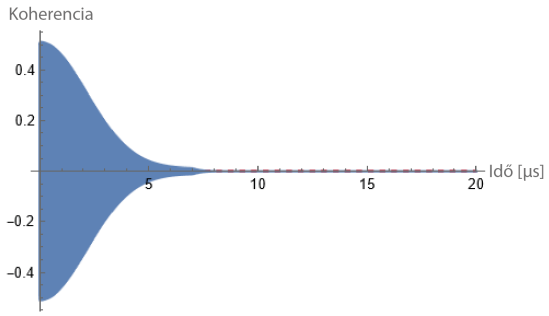
- $\mathcal{N}_S = 0.001$

Az eredmények oszcillációt mutatnak, amely krekvenciája a Zeemann felhasadás mértékével arányos. Azonban, ahogyan azt a következő ábrákon láthatjuk is, a koherencia időn nem változtat a mágneses tér. A függvény illesztést a görbe burkolójára végeztem el.



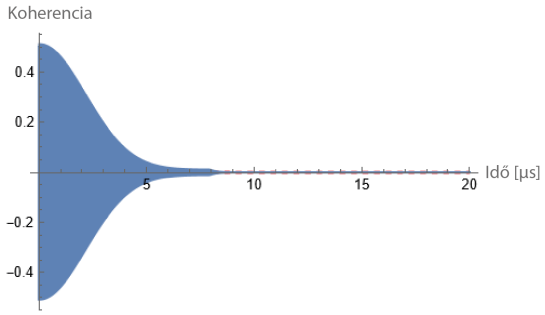
(a) $B = 0$

$T_2^* = 2.9869\,\mu s$ $n = 2.0330$



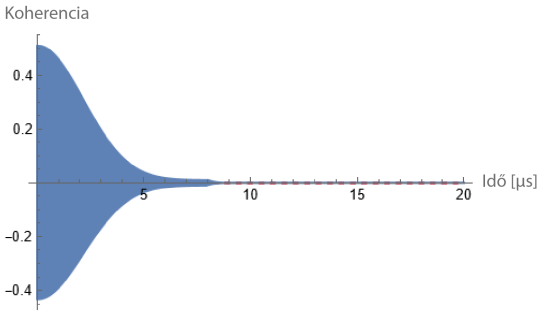
(b) $B = 10$

$T_2^* = 2.9437\,\mu s$ $n = 1.9548$



(c) $B = 1000$

$T_2^* = 2.9220\,\mu s$ $n = 1.9172$



(d) $B = 10000$

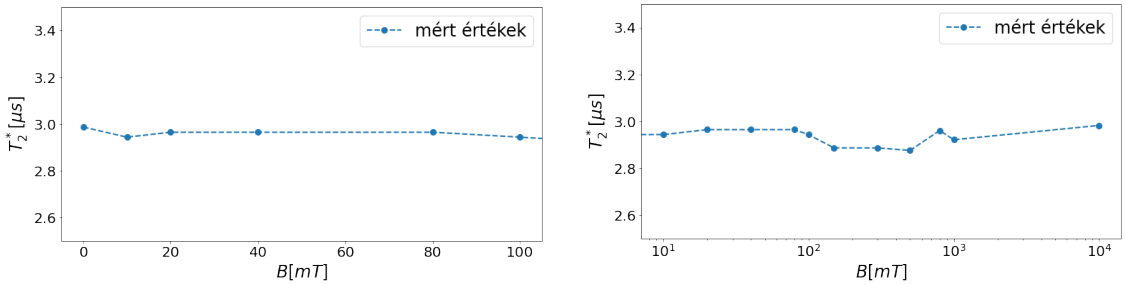
$T_2^* = 2.9829\,\mu s$ $n = 2.0255$

9. ábra. A szimuláció eredménye négy különböző külső mágneses tér esetén és az illesztett függvény paraméterei. Az nem nulla mágneses tér értéknél annyira gyors az oszcilláció, hogy a burkoló alatti területet teljes egészében kitölti az oszcilláló görbe.

$B = 10\,mT$ és $B = 1\,T$ között is végeztünk számításokat, de mivel az oszcillációk sűrűségén kívül más nem változik, ezt pedig a 10a. és 10b. ábra is alátámasztja, azokat nem tartalmazza a dolgozatom.

A következőkben ábrázoltam a számolt T_2^* értékeket a mágneses tér függvényé-

ben. Ahogyan arra számítani lehetett, a külső mágnes tér nem befolyásolja nagyban a dekoherencia idejét, a gépi hibát figyelembe véve pedig konstansnak mondható.



(a) A $B = 0\,mT$ és $B = 100\,mT$ közötti értékek.

(b) Az összes eredmény logaritmikus skálán ábrázolva.

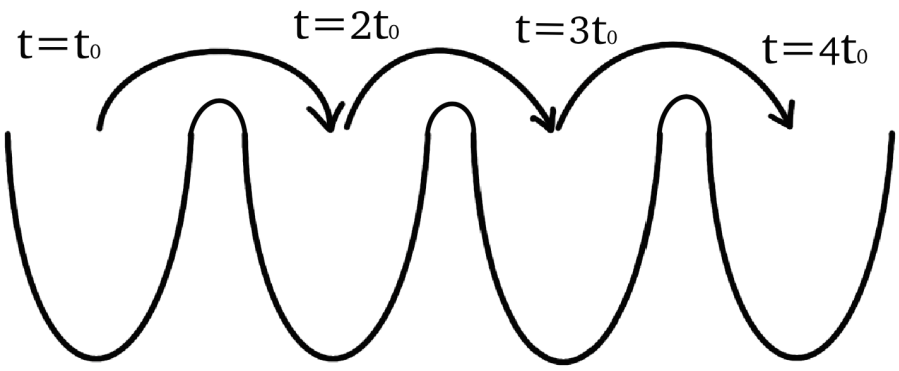
10. ábra. A koherencia mágnese tér függése. A szembeötlő kilengés 0.1 μs -on belül mozog és csak az illesztési hibából származik.

Azt is megfigyelhettük az eddigiekben, hogy az illesztett n paraméter értéke egy darab kvantumpötty esetén jellemzően kettő körüli,

$$|n| \approx 2,$$

amely megegyezik az várakozásainkkal.

5. Saját eredmények III. - Mozgó spinkubit numerikus szimulációja



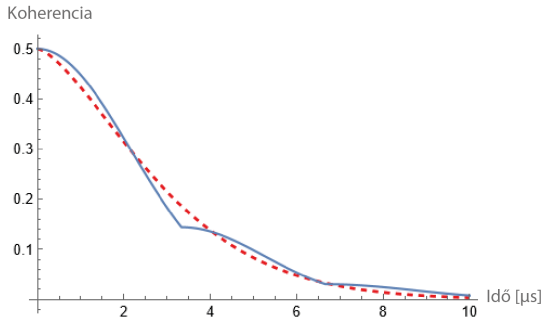
11. ábra. Sematikus ábrázolása a több kvantumpöttyön is áthaladó elektronspinnek. Minden potenciálgödörben egyenlő t_0 ideig tartózkodik.

Ebben a számítás sorozatban csak a kvantumpöttyök számát változtattam. Az egyes kvantumpöttyökben egyenlő ideig tartózkodik az elektron, valamint az elektron átmozgatása az egyik kvantum pöttyből a másikba pillanat szerű. Ez újfent egy közelítés, azonban nem várunk az eredmény szempontjából minőségi változást az adiabatikusan átugró elektron esetéhez képest. Amit tapasztalnánk, az nem más, mint hogy az elektron tovább kölcsönhat az egyik kvantumpötty magspinjeivel.

A használt paraméterek a következők voltak:

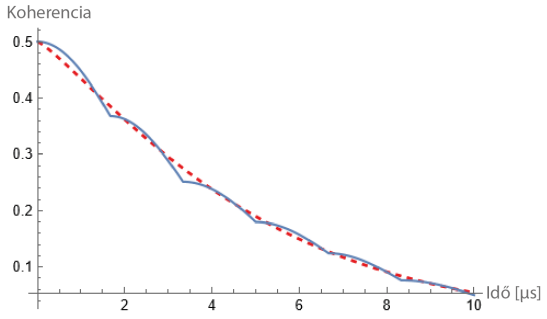
- $B = 0\,mT$
- $\mathcal{N}_{\mathrm{S}} = 0.001$

Közösen ábrázolva a három mérést, jól látható a dekoherencia idejének meg-



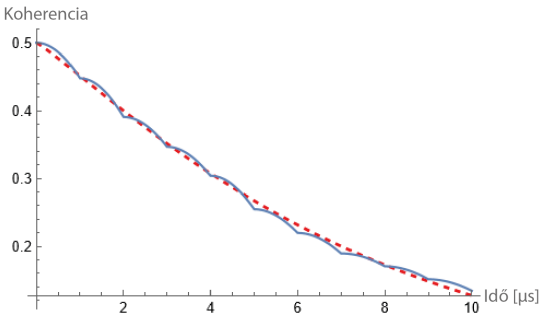
(a) $N_{\text{qdot}} = 3$

$T_2^* = 3.3647\,\mu s$ $n = 1.4727$



(b) $N_{\text{qdot}} = 6$

$T_2^* = 5.1314\,\mu s$ $n = -1.1969$



(c) $N_{\text{qdot}} = 10$

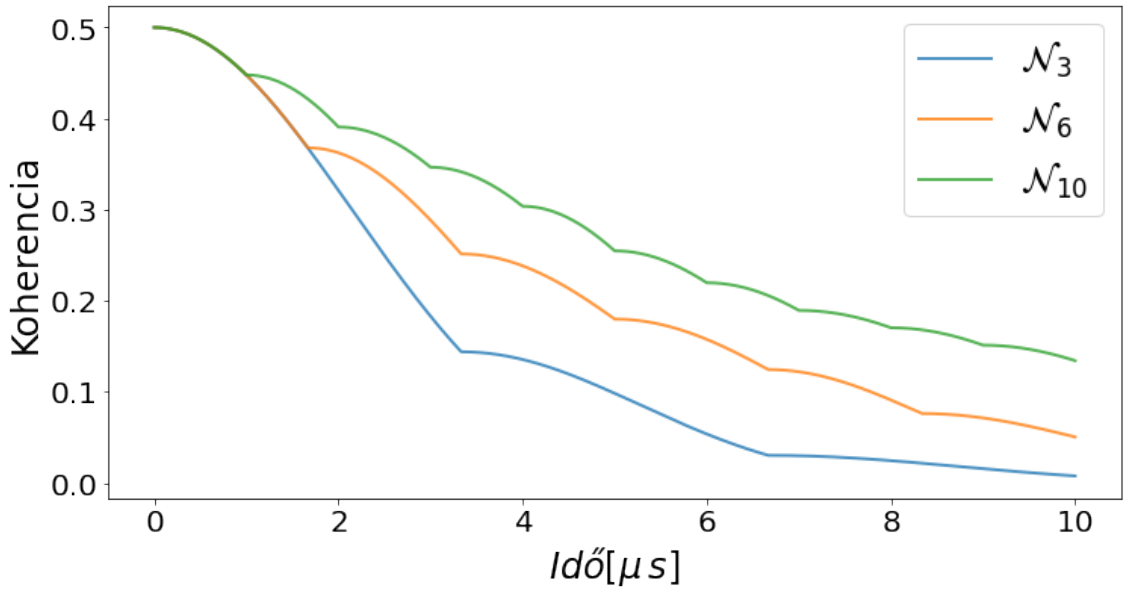
$T_2^* = 7.5694\,\mu s$ $n = -1.1270$

12. ábra. Jól kivehető a lépcsőszerű görbét okozó kvantumpöttyök közti átmenet. Fontos megjegyezni, hogy a y tengely beosztása változik az egyes alábrákon.

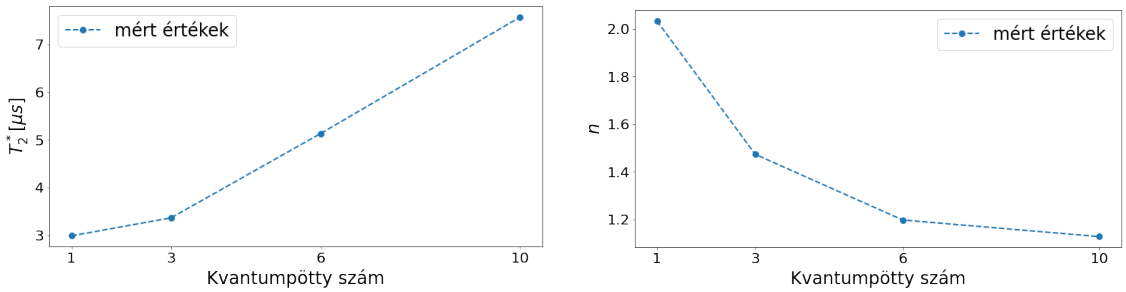
nyúlása. Fontos észrevennünk, hogy minden kvantumpöttyben a koherencia újabb Gausszi függvényt követve kezd lecsengeni. Azaz, az újabb (Hilbert) alteren felvett fázis az előzőtől teljesen függetlenül veszíti el koherenciáját. Ezt a 13. ábrán is láthatjuk, amikor az újabb kvantumpöttybe lépve, a koherencia szinte vízszintesen kezd változni, majd az ismert lecsengést követi. Mindemellett az is leolvasható az ábráról, ahogyan a három különböző számítás esetén a görbék amíg az első kvantumpöttyben voltak, egymást követték és ugyanúgy fejlődtek, amíg tovább nem "repültek" a következő pöttybe.

Vizsgáljuk meg a különböző kvantumpöttyök függvényében, hogyan változnak az illesztett paraméterek (T_2^*, n) (14a. és 14b. ábra). A T_2^* esetén azt láthatjuk amire már a 13. ábra is utalt. A dekoherencia idejének kitolódását. Ez nagyon

fontos észrevétel és egyben a dolgozatom egyik fő eredménye. Az n paraméternél pedig megfigyelhető ugyanez a jelenség, hiszen az csökken, tehát a burkoló függvény lasabban cseng le.



13. ábra. Különböző kvantumpötty számokon futtatott szimulációk eredményei.



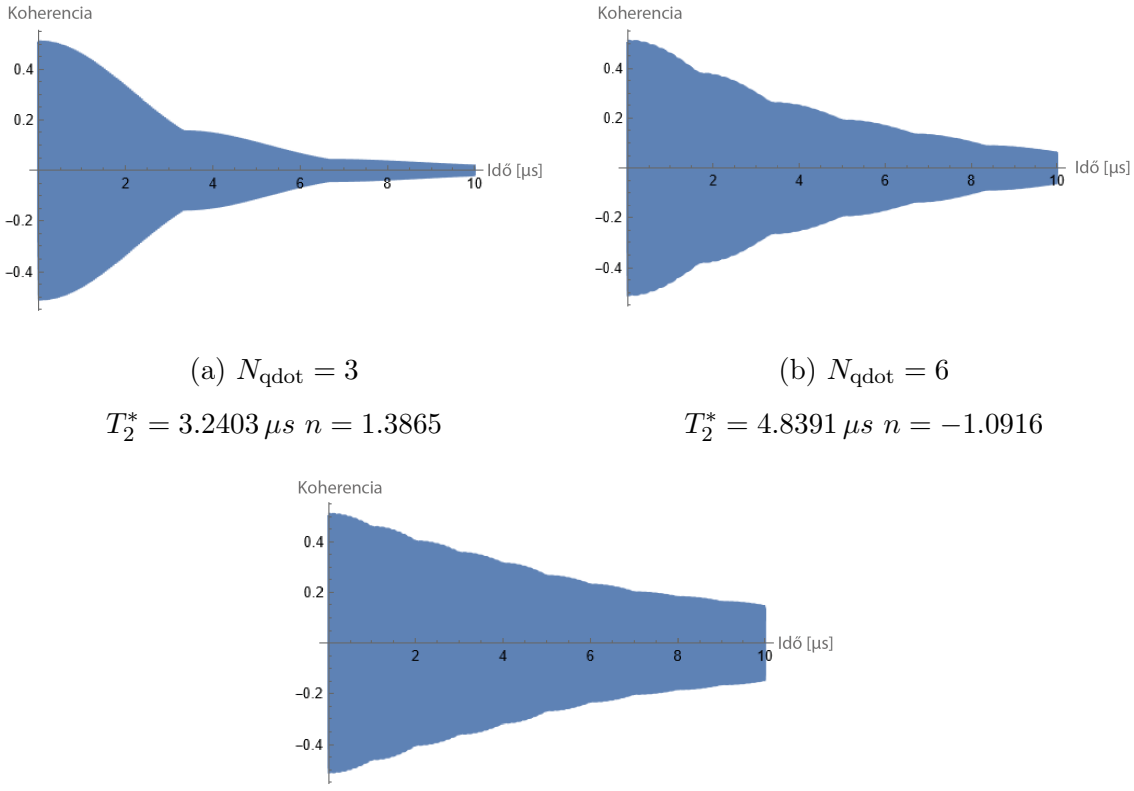
(a) T_2^* függése. (b) n függése.

14. ábra. (a) Koherencia idő a kvantum pöttyök számának függvényében. Jól látható, hogy megnő a dekoherencia idő.(b) Exponens a kvantum pöttyök számának függvényében. Azt tapasztaljuk, hogy egyre több kvantumpötty hatására, egyre csökken.

5.1. Több kvantumpöttyön átfutó elektron spin esete külső mágneses térrel

Az előző számolást ismételtem meg, ezúttal úgy, hogy $B \neq 0$. Amit tapasztalni fogunk, az nem más, mint a már bemutatott oszcilláció, azonban most kvantumpöttyönként és az előző fejezetben látott lépcsős görbét követve. A három folyamat során a következő paraméterek változatlanok voltak:

- $B = 10\,mT$
- $\mathcal{N}_{\mathrm{S}} = 0.001$



(a) $N_{\mathrm{qdot}} = 3$

$T_2^* = 3.2403\,\mu s$ $n = 1.3865$

(b) $N_{\mathrm{qdot}} = 6$

$T_2^* = 4.8391\,\mu s$ $n = -1.0916$

(c) $N_{\mathrm{qdot}} = 10$

$T_2^* = 7.3738\,\mu s$ $n = -1.0536$

15. ábra. Az eredmények és az illesztés paraméterei.

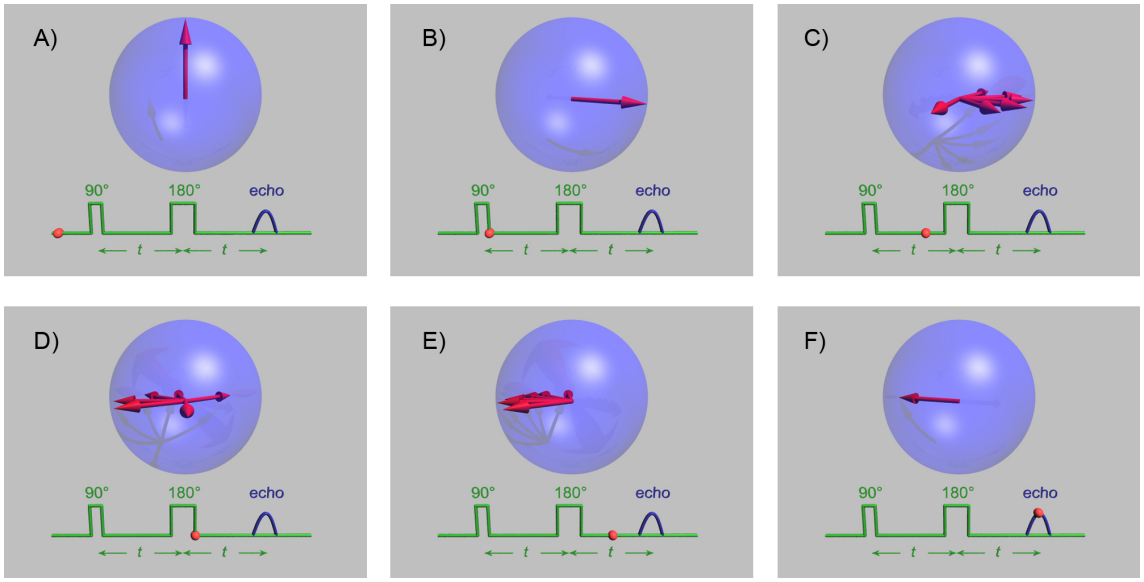
Most sincs szignifikáns különbség a mágneses tér melleti koherencia időnek. Láthatjuk, ha összevetjük a 12. ábrán feltüntetett értékekkel.

6. Saját eredmények IV. - Spin visszaverődés általánosítása mozgó spinqubitre

Az spin visszaverődés (spin echo) a spin fázis információinak regenerációját, újrafókuszálódását jelenti. Ezek alapvetően olyan fázis információk melyek már elvesztek a szabad indukciós lecsengés (Free induction decay) során. Ezen azonban egy rezonáns elektromágneses impulzussal változtathatunk.

A fázisok spin visszaverődésként való „újjászületése" azért lehetséges, mert számos T_2^* folyamat, amely eredetileg a szabad indukciós lecsngés okozta, szimmetrikusan reverzibilis. Valójában a jel nagy része nem semmisült meg, pusztán "dezorganizálódott", mert a sokspin rendszer alterei elvesztették fáziskoherenciájukat. A rendszerről azt mondják, hogy "rejtett renddel" vagy "atomi memóriával" rendelkezik. Egy rádiófrekvenciás impulzus alkalmazásával az eredeti szabad indukciós lecsengés bizonyos fázisú komponensei újra fókuszálhatók spin visszaverődéssé. Ez a spin visszaverődés vagy spin echo angolul.

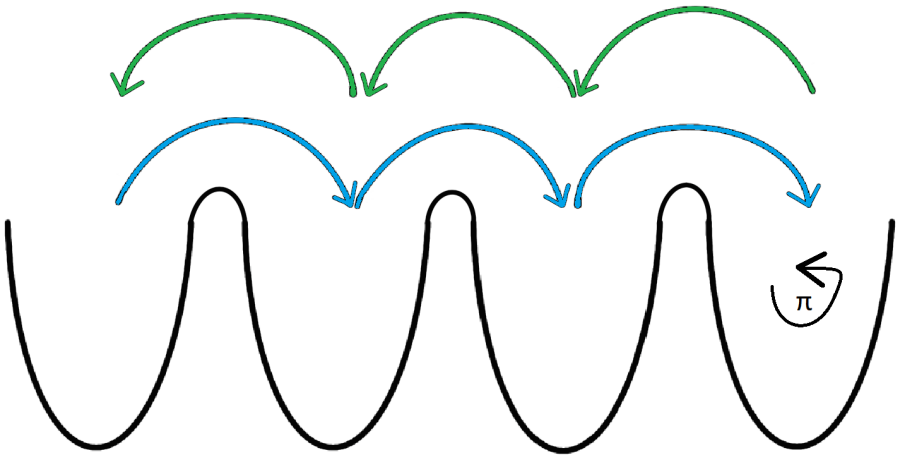
A folyamatot a 16. ábra szemléletesen mutatja. A C) D) és E) képek közti események a következők: Minden fázisnak (nyílnak) más-más a sebessége, ezért a 180°-os forgatás pillanatában egyesek nagyobb elfordulást szenvednek mint mások. A forgatást követően azonban a sebességük megmarad, csak most a lassabbak közelebb lesznek az újrafókuszálódás pozíciójához, míg a gyorsabbak távolabb és ezért egyszerre fognak összeállni, újra fokuszálódni.



16. ábra. A) Gerjsztés előtti spin. B) A 90°-os elfordulást okozó pulzus utáni állapot. C) a mező inhomogenitásából adódó fázisvesztett spinek. D) A spinek megfordulása a 180°-os fordulást okozó pulzust követően, ez negálja a fázisokat. E) Az újrafókuszálást követően a spinek ismét szétválnak különböző fázisokkal. F) A spin visszaverődés és a spinek újboli fókuszálódása.

6.1. Visszafordított elektron szimulációja

A fentebb bevezetett elmélet alapján elvégeztem olyan számításokat is, melyek során az elektronspinre hattatok egy π impulzust. Ilyenkor a felvett fázisok ellentétes előjelűek lesznek. Ezt kihasználhatjuk arra, hogy ha ezt a mozgó elektronspint megfordítjuk az utolsó kvantumpöttyében és elindítjuk visszafelé, a felvett fázisok negáltjait veszik fel és így visszaépíthető a koherencia. Ezt több paraméter mellett is megvizsgáltam.



17. ábra. A visszafordítás sematikus ábrája. Fontos, hogy ebben az esetben is minden gödörben egyenlő ideig tartózkodik az elektron spin.

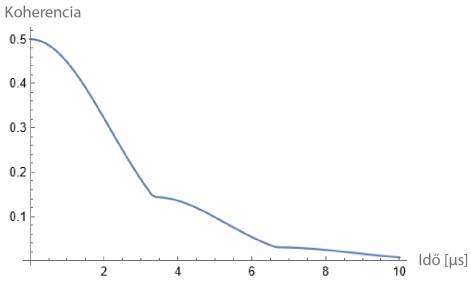
6.2. Eredmények

A beállított paraméterek a következők (ezúttal a szimulációs időn is változtattam):

- $B = 0\,mT$
- $\mathcal{N}_{\mathrm{S}} = 0.001$

Az utolsó két képen szándékosan magasra állítottom a szimulációs időt, hogy a dekoherencia teljesen bekövetkezzen, így bemutatva, hogy a π pulzust követő "irányváltással" teljesen visszaépülhet a koherencia. Ez persze a gyakorlatban szinte soha nem lehet teljes újrafókuszálódás, hiszen az Si magspinek állapota megváltozhat a két út között.

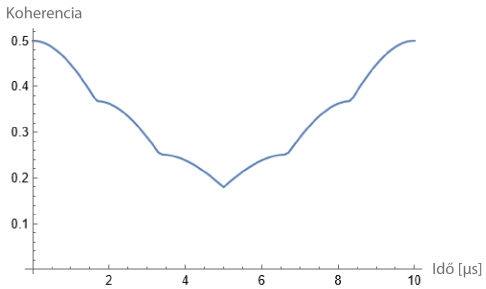
Az ábrákon jól látható, hogy sikerült általánosítani, és numerikusan demonstrálni a spin visszaverődés jelenségét kvantumpöttyökben mozgó elektron spin esetére. Ezen eredmény jelentőségét az adja, hogy az mozgó elektron spineket lehet koherens linkként használni távoli kvantumos rendszerek közt, például egy kvantum pro-



(a) Nem forgatjuk meg az elektront.

$N_{\text{qdot}} = 3$

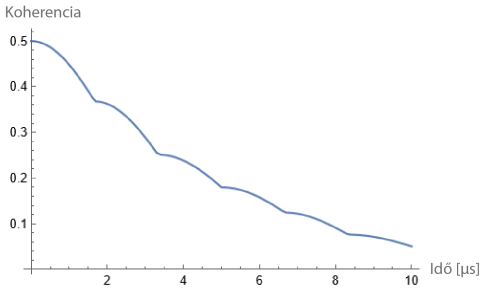
$t_{szim} = 10\,\mu s$



(b) Megforgatjuk az elektront.

$N_{\text{qdot}} = 3$

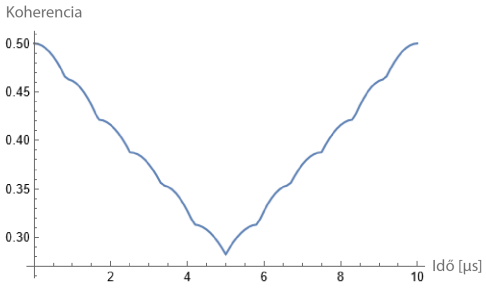
$t_{szim} = 10\,\mu s$



(c) Nem forgatjuk meg az elektront.

$N_{\text{qdot}} = 6$

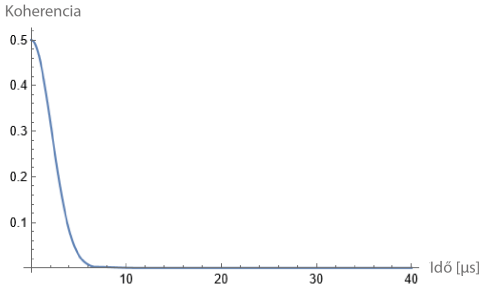
$t_{szim} = 10\,\mu s$



(d) Megforgatjuk az elektront.

$N_{\text{qdot}} = 6$

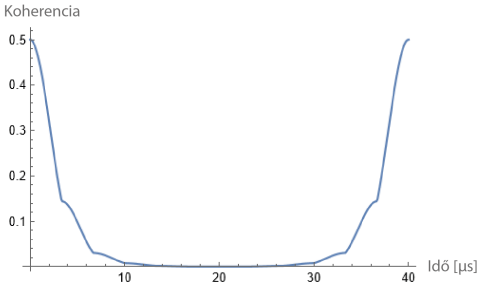
$t_{szim} = 10\,\mu s$



(e) Nem forgatjuk meg az elektront.

$N_{\text{qdot}} = 6$

$t_{szim} = 40\,\mu s$



(f) Megforgatjuk az elektront.

$N_{\text{qdot}} = 6$

$t_{szim} = 40\,\mu s$

18. ábra. A szimuláció eredménye négy különböző kvantumpötty szám esetén.

cesszor különböző részi közt. Ezt ki lehet használni új, jól skálázható architektúrák kifejlesztésében.

7. Diszkusszió

A tudományos diákköri kutatómunkám során félvezető nanoszerkezetekben csapdázott illetve azokaban mozgó elektronspin kubitek T_2^* koherencia idejét vizsgáltam numerikus módszerekkel. A szimulációkhoz szükséges módszer kifejlesztését és implementálását követően, elsőként a helyhez kötött spinkubitek koherenciáját vizsgáltam illetve az illesztéssel meghatározott koherenciaidőt kísérelti eredményekkel összevetve validáltam a kifejlesztett módszert. Ezt követően a kvantumpöttyökön keresztül mozgó spinkubitek koherenciaidejét vizsgáltam. Megmutattam, hogy a spinkubitek mozgatása pozitív hatással van a T_2^* koherenciaidőre, hiszen a koherenciafüggvény alakja megváltozik illetve ezzel párhuzamosan a koherenciaidő is meghosszabbodik. Tapasztalataim szerint, a koherencia idő annál hosszabb minél gyorsabban ugrál az elektron a kvantumpöttyök közt. Végezetül általánosítottam a spin visszaverődés (spin echo) jelenségét mozgó elektronspinekre. A szimulációim segítségével megmutattam, hogy a jelenség kialakításához két feltételnek kell teljesülnie, i) egy Pi-pulzust kell alkalmazni, majd ii) meg kell fordítani az elektron mozgásirányát és vissza kell juttatni a kiindulási kvantumpöttybe.

Várakozunk szerint ezek az eredmények felkeltik majd a tudományos közösség érdeklődését és akár új irányba is terelheti a félvezetőalapú kvantum számítástechnikai kutatásokat. A dolgozatban tárgyalt jelenségek egy még részletesebb kidolgozást követően az eredményeket mindenképp publikálni szeretnénk egy referált szakfolyóirati cikk formájában.

A TDK munkám során implementált szimulációs eljárás egyszerű módosításokkal alkalmassá tehető realisztikus rendszerek szimulálására illetve összetettebb koherencia jelenségek tanulmányozására. A fontosabb felhasznált közelítéseket összefoglalva:

- Overhauser-mező zérusnak vétele
- dipól-dipól kölcsönhatás elhanyagolása a hiperfinom tenzorból
- magspin-magspin kölcsönhatás elhanyagolása a HFK-ból
- nem adiabatikusan ugró elektron implementálása

Ezen közelítéseket lecserélhetjük, így egy pontosabb szimulációt elérve. A jövőben kiemelt céljaink közt szerepel,

1. a hőmérsékleti effektusok, valamint lehetséges kísérleti megvalósításokban előforduló tökéletlenségek okozta zavaró hatások szimulálása és tanulmányuzása,

2. a T_2^* időállandón túl, a T_2 valamit a T_1 időállandók meghatározása,

3. dinamikus lecsatolási pulzusszekvenciák általánosítása mozgó spinkubitekre, illetve

4. mozgó spinkubitekkel magvalósított kapuműveletek kidolgozása.

A dolgozatban tárgyalt és annak folytatásaként tervezett kutatómunkám eredményeit fel szeretnénk használni olyan újszerű félvezető-alapú kvantumszámítógépek tervrajzainak a megalkotásához, amelyek mozgó (és helyhez kötött) elektron spineket használnak és akár megemelt működési hőmérsékleteken is koherensek tudnak maradni.

Hivatkozások

[1] G. Burkard, T. D. Ladd, J. M. Nichol, A. Pan, and J. R. Petta, „Semiconductor spin qubits."

[2] A. Chatterjee, P. Stevenson, S. De Franceschi, A. Morello, N. P. de Leon, and F. Kuemmeth, „Semiconductor qubits in practice," vol. 3, no. 3, pp. 157–177. Number: 3 Publisher: Nature Publishing Group.

[3] B. Bertrand, S. Hermelin, S. Takada, M. Yamamoto, S. Tarucha, A. Ludwig, A. D. Wieck, C. Bäuerle, and T. Meunier, „Fast spin information transfer between distant quantum dots using individual electrons," vol. 11, no. 8, pp. 672–676. Number: 8 Publisher: Nature Publishing Group.

[4] H. Flentje, P.-A. Mortemousque, R. Thalineau, A. Ludwig, A. D. Wieck, C. Bäuerle, and T. Meunier, „Coherent long-distance displacement of individual electron spins," vol. 8, no. 1, p. 501. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group.

[5] A. R. Mills, D. M. Zajac, M. J. Gullans, F. J. Schupp, T. M. Hazard, and J. R. Petta, „Shuttling a single charge across a one-dimensional array of silicon quantum dots," vol. 10, no. 1, p. 1063. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group.

[6] P. L. J. Helgers, J. A. H. Stotz, H. Sanada, Y. Kunihashi, K. Biermann, and P. V. Santos, „Flying electron spin control gates," vol. 13, no. 1, p. 5384. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group.

[7] L. V. C. Assali, H. M. Petrilli, R. B. Capaz, B. Koiller, X. Hu, and S. Das Sarma, „Hyperfine interactions in silicon quantum dots," *Phys. Rev. B*, vol. 83, p. 165301, Apr 2011.

[8] M. Onizhuk, K. C. Miao, J. P. Blanton, H. Ma, C. P. Anderson, A. Bourassa, D. D. Awschalom, and G. Galli, „Probing the coherence of solid-state qubits at avoided crossings," vol. 2, no. 1, p. 010311. Publisher: American Physical Society.

The cell to rule them all

In[ ]:=
```
(* ---------------PARAMETERS--------------- *)
NQdot = Qdot; (* qdot number *)

GammaEl = 28.024; (* MHz/mT*)
a2 = 18.5 (*mT*) * GammaEl; (* MHz*)
VPC = 0.0400 * 10^(-27);
GammaNuc = -0.008465; (* MHz/mT*)
Bz = B; (*mT*)(* B → magnetic vector *)
c29Si = C29Si; (* nuclear spin abundance *)
dirname = Dname;
(*----------------------------------------*)
SetDirectory@NotebookDirectory[];
newfolder = CreateDirectory[dirname];
SetDirectory[newfolder];
(* ---------------PARAMETERS--------------- *)


(* ---------------Basic definitions--------------- *)

(* Spin and identity operators *)
(* Electron spin (flying-qubit) S = 1/2 *)
(* Nuclear spins 29Si I = 1/2  *)

S = 0.5;

(* spin operators (the quantization basis of S_z*)
(* ladder operator S+ *)
opP = Table[KroneckerDelta[x, y + 1] * Sqrt[(S * (S + 1.0) - x * y)],
    {x, S, -S, -1.0}, {y, S, -S, -1.0}];

(* ladder operator S- *)
opM = Table[KroneckerDelta[x + 1.0, y] * Sqrt[(S * (S + 1.0) - x * y)],
    {x, S, -S, -1.0}, {y, S, -S, -1.0}];

(* operator S_x *)
opX = 1.0 / 2.0 * (opP + opM);

(* operator S_y *)
opY = 1.0 / (2.0 * I) * (opP - opM);

(* operator S_z *)
opZ = Table[KroneckerDelta[x, y] * x, {x, S, -S, -1.0}, {y, S, -S, -1.0}];

(* identity operator *)
Id = Table[KroneckerDelta[x, y], {x, S, -S, -1.0}, {y, S, -S, -1.0}];
```

Printed by Wolfram Mathematica Student Edition

```
(* States in S_z quantization basis *)
(* p1 and m1 are the two states *)
p1 = {1.0, 0.0};
m1 = {0.0, 1.0};

(* --------------Quantum dot + wavefunction of the electron-------------- *)

(* Quantum dot potential:
infinite wall in z direction (Lz is the width of the potential well),
parabolic potential in x-y direction:
U(x) = 1/2 * m * omx^2 * x^2
omx=omega_x ; *)

(* Loading a package containing physical constants;
for more visit: https://reference.wolfram.com/language/PhysicalConstants/guide/
  PhysicalConstantsPackage.html *)
Needs["PhysicalConstants`"];
Needs["Units`"];
(* Function that cuts off units *)
(*Un[N_,M_]:=QuantityMagnitude[Quantity[N,"M"]] //First;*)
Un[X_] := N[X] // First;

(* Defining elenctron mass and hbar *)
M = Un[ElectronMass];
Hbar = Un[PlanckConstantReduced];

(* Static solution *)
sigmax = 10^(-8); (* m *)
sigmay = 10^(-8); (* m *)
omx =  Hbar / M / sigmax^2;(* Hz *)
omy =  Hbar / M / sigmay^2;

Lz = 2. * 10^(-9) ; (* m *) (* nz = {1, 2,... inf} *)

(* Phi *)
PhiX[nx_, x_] := 1.0 / Sqrt[2.0^nx * nx!] * HermiteH[nx, Sqrt[M * omx / Hbar] * x] *
    Exp[-M * omx * x^2 / 2.0 / Hbar] * (M * omx / Pi / Hbar)^(1 / 4);
PhiY[ny_, y_] := 1.0 / Sqrt[(2.0^ny) * ny!] * HermiteH[ny, Sqrt[M * omy / Hbar] * y] *
    Exp[-M * omy * y^2 / 2.0 / Hbar] * (M * omy / Pi / Hbar)^(1 / 4);
PhiZ[nz_, z_] := Sqrt[2. / Lz ] * Cos[nz * Pi * z / Lz];

(* Energy; Joule *)
Ex[nx_] := Hbar * omx * (nx + 0.5);
Ey[ny_] := Hbar * omy * (ny + 0.5);
Ez[nz_] := (nz * Pi / Lz)^2 / 2.0 / M;

(* Together: *)
Exyz[nx_, ny_, nz_] := Ex[nx] + Ey[ny] + Ez[nz];
PhiXYZ[nx_, ny_, nz_, x_, y_, z_] := PhiX[nx, x] * PhiY[ny, y] * PhiZ[nz, z];
```

```
(* Nuclear spins interact with the spin
 density (=charge density for an electron) *)
SpinDensity[nx_, ny_, nz_, x_, y_, z_] :=
  Conjugate[(PhiXYZ[nx, ny, nz, x, y, z])] * (PhiXYZ[nx, ny, nz, x, y, z]);

(* ---------------Simulation box filled with nuclei--------------- *)

(* Simulation box *)
(* defining the size of the box *)
Lx = 6.0 * sigmax;
Ly = 6.0 * sigmay;
(* Lz is Lz (defined before, going to infinite) *)
(* Plot[PhiZ[1,z],{z,-Lz/2,Lz/2}] *)

(* Density of the atoms and abundance of the paramagnetic isotopes *)
(* Si *)
nSi = 50.0 / (10.0^(-27));
(* GaAs *)
(* nGaAs= 0.00000/(10.0^(-27));  not used *)

(* Normalization *)
NIntegrate[SpinDensity[0, 0, 1, x, y, z],
  {x, -Lx / 2.0, Lx / 2.0}, {y, -Ly / 2.0, Ly / 2.0}, {z, -Lz / 2.0, Lz / 2.0}];
(* Number of atoms in the simulation box *)
NAtomSBoxSi = NQdot * nSi * Lx * Ly * Lz; (* Size of the whole system *)
(* Number of spin in the simulation box *)
Nnuclei = IntegerPart[ c29Si * NAtomSBoxSi];
(* Random, even destribution of nuclear spins in the simulation box *)
SeedRandom[1234];
NucleiPositions = Table[{Lx * (RandomReal[] - 0.5),
    Ly * (RandomReal[] - 0.5), Lz * (RandomReal[] - 0.5)}, Nnuclei];

(* the i-th nucle spin's x,y,z components *)
Rx[i_] := NucleiPositions[[i, 1]];
Ry[i_] := NucleiPositions[[i, 2]];
Rz[i_] := NucleiPositions[[i, 3]];

(* ---------------Hyperfine Interaction--------------- *)
(* Fermi contact term from PHYSICAL REVIEW B 83,165301 (2011) *)

aFunnction[SD_] := a2 * SD * VPC;
TheDensity[x_, y_, z_] := SpinDensity[0, 0, 1, x, y, z];
(* The spin density in basic state*)
TableOfAfc = Table[aFunnction[TheDensity[Rx[i], Ry[i], Rz[i]]], {i, Nnuclei}];
(* Table of interaction term of Fernmi contanct *)


(* ---------------Time evolution
  (static real space wavefunction, hyperfine is constant in time)--------------- *)
```

```
(* Hamiltonian (devided by Hbar) *)
HZeemanEl[B_] := GammaEl * KroneckerProduct[B * opZ, Id];
HZeemanNuc[B_] := GammaNuc * KroneckerProduct[Id, B * opZ];

HHyp[Azz_] := Azz * KroneckerProduct[opZ, opZ];

Hamiltonian[B_, Azz_] := HZeemanEl[B] + HZeemanNuc[B] + HHyp[Azz] ;
(* new fast version: CCE1 *)

(* Coherence function *)
cohFuncU[B_, Azz_, t_, ti_, to_] :=
  0.5 * Exp[-I * 2.0 * Pi * ((Hamiltonian[B, 0.0][[1, 1]] - Hamiltonian[B, 0.0][[3, 3]] ) *
         HeavisideTheta[t - to] * (t - to) +
        (Hamiltonian[B, Azz][[1, 1]] - Hamiltonian[B, Azz][[3, 3]] ) * HeavisideTheta[t - to] *
         (to - ti) + (Hamiltonian[B, Azz][[1, 1]] - Hamiltonian[B, Azz][[3, 3]] ) *
         HeavisideTheta[to - t] * HeavisideTheta[t - ti] * (t - ti) +
        (Hamiltonian[B, 0.0][[1, 1]] - Hamiltonian[B, 0.0][[3, 3]] ) * HeavisideTheta[t - ti] *
         ti + (Hamiltonian[B, 0.0][[1, 1]] - Hamiltonian[B, 0.0][[3, 3]] ) *
         HeavisideTheta[ti - t] * t)];
cohFuncD[B_, Azz_, t_, ti_, to_] :=
  0.5 * Exp[-I * 2.0 * Pi *
     ((Hamiltonian[B, 0.0][[2, 2]] - Hamiltonian[B, 0.0][[4, 4]] ) * HeavisideTheta[t - to] *
        (t - to) + (Hamiltonian[B, Azz][[2, 2]] - Hamiltonian[B, Azz][[4, 4]] ) *
        HeavisideTheta[t - to] * (to - ti) +
       (Hamiltonian[B, Azz][[2, 2]] - Hamiltonian[B, Azz][[4, 4]] ) *
        HeavisideTheta[to - t] * HeavisideTheta[t - ti] * (t - ti) +
       (Hamiltonian[B, 0.0][[2, 2]] - Hamiltonian[B, 0.0][[4, 4]] ) * HeavisideTheta[t - ti] *
        ti + (Hamiltonian[B, 0.0][[2, 2]] - Hamiltonian[B, 0.0][[4, 4]] ) *
        HeavisideTheta[ti - t] * t)];

(* Simulation *)
tsim = tlim;
dt = tstep;
TQdot = tsim / NQdot;
AQdot = Nnuclei / NQdot;
CohFunc[t_, tsim_] := (
   Coht = 0.5;
   For[i = 1, i ≤ Nnuclei, i++,
    ipos = IntegerPart[ i / AQdot ];
    Coht *=
     ( 0.5 * cohFuncU[Bz, TableOfAfc[[i]] , t + 10^(-10), ipos * TQdot, (ipos + 1.0) * TQdot] +
        0.5 * cohFuncD[Bz, TableOfAfc[[i]] , t + 10^(-10),
          ipos * TQdot, (ipos + 1.0) * TQdot]) / 0.5;
   ];
   Coht);

(* Calculating result *)
RESULT = Table[{t, Re[CohFunc[t, tsim]]}, {t, 0, tsim, dt}];
(* the plotted result *)
data = ListLinePlot[RESULT[[ ;; , 2]], DataRange → {0.0, tsim}, PlotRange → All,
```

```
   PlotLabel → "Simulated data", AxesLabel → {"Time", "Coherence"}];

(* get the cover of the curve; Finding its peaks *)
peaks = FindPeaks[Abs[RESULT[[ ;; , 2]]], 1];
(* pairing the peaks with their time values *)
fitdat = Transpose[{RESULT[[ ;; , 1]][[peaks[[ ;; , 1]]]], peaks[[ ;; , 2]]}];
(* Function to be fitted: *)
f = 0.5 * Exp[- (t / T2) ^Abs[n]];

(* Fitting: *)
If[Bz == 0.0,
 fitres = FindFit[RESULT, f , {T2, n}, t];]
If[Bz ≠ 0.0,
 fitres = FindFit[fitdat, f , {T2, n}, t];]

(* Showing the fitted function *)
data2 =
  Plot[f /. fitres, {t, 0.0, tsim}, PlotRange → All, PlotStyle → {Red, Dashed, Thick},
   PlotLabel → "Fitted function", AxesLabel → {"Time", "Coherence"}];
(* plotting together: *)
data3 = Show[data2, data, PlotRange → All, PlotLabel →
    "The simulated data and the fitted function", AxesLabel → {"Time", "Coherence"}];

(* variables with the set and calculated parameters *)
setpar = {"Bz:", Bz, "c29Si-nuclear spin abundance:",
   c29Si, "NQdot:", NQdot, "Parameters:", fitres};
(* saving the set and fitted parameters with the simulated data *)
Export["Parameters.txt", {setpar, Nnuclei, RESULT}];
(* saving the plots *)
Export["Simulated data.png", data];
Export["Fitted function.png", data2];
Export["The simulated data and the fitted function.png", data3];

fitres =.;
f =.;
NQdot =.;
Bz =.;
c29Si =.;
dirname =.;

(* Set printing option so that syntax highlightning
 stays colored after exporting notebook to PDF*)
SetOptions[SelectedNotebook[],
 PrintingStyleEnvironment → "Printout", ShowSyntaxStyles → True]
```