

Multispin-koherencia jelenségek vizsgálata VB(-) spin kvantumbit esetén

TDK dolgozat

Készítette:

Tibiássy Adalbert István

Fizika BSc. III. évfolyam

Témavezető:

Dr. Ivády Viktor

ELTE TTK, Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék



Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

2023.01.11.

Kivonat

A kvantumösszefonódás egy nagyon fontos, és mai napig aktívan kutatott terület, ahogy erre a 2022. évi fizikai Nobel-díj kiosztása is rámutatott. A kubitek viselkedésének tanulmányozása innovatív perspektívákat nyitott, melynek hosszú távon jelentős technológiai és technikai vonatkozásai várhatók. Számos lehetséges platform közül a kutatásomban egy kontrollálható kvantum-mechanikai rendszert, az egyes félvezetőkben fellelhető pont hibák által alkotta kubitet vizsgáltam. A megfigyelt félvezető kristály bór-nitrid volt (BN). A bór-vakancia centrumból és az azt körülvevő magspinekből felépülő sokspines rendszer egzakt időfejlődését szimuláltam numerikus úton. A csatolt sokspin rendszer koherens tulajdonságait figyeltem meg. Ismert, hogy ha a rendszert mikrohullámú tartományba eső elektromágneses hullámmal gerjesztjük, akkor további jelenségek lépnek fel, amelyek közül a mágneses rezonanciát igyekeztem felderíteni. Különböző frekvenciájú és amplitúdójú mágneses térek hatását figyeltem a koherencia jelenségekre, és megpróbáltam választ adni arra, hogy lehetséges-e a spineket összefonódott állapotba helyezni, ezáltal a koherenciaidőt potenciálisan megnövelni. A szimulációk során a statikus mágneses tér nagyságát is változtattam. A dolgozat egy másik célja, hogy a koherencia-időre vonatkozó ellentmondásos kísérleti eredményekre - melyek között jelentős nagyságrendi eltérés adódott - magyarázatot adjon.

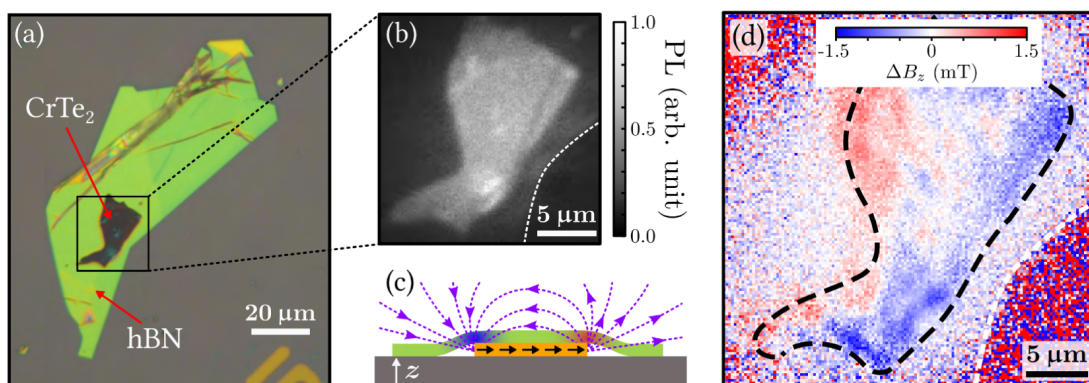
Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Elméleti háttér	6
2.1. A sűrűségoperátor	6
2.2. A sűrűségoperátor bevezetése	6
2.3. A sűrűségoperátor dinamikája	8
2.4. A posztulátumok átfogalmazása	10
2.5. A Bloch-gömb	11
2.6. A "rotating wave" közelítő módszer [2]	13
3. Szimulációs módszer	19
3.1. A fizikai rendszer	19
3.2. A rendszer Hamilton-operátora	20
3.3. A felhasznált algoritmus	24
4. Eredmények I. - A statikus rendszer energia szintjeinek meghatározása	26
4.1. A magspinek hatása az energiaszintek felhasadására	26
5. Eredmények II. - A gerjesztett rendszer dinamikája	30
5.1. Rabi-oszcilláció	31
5.2. A rezonanciagörbe finomszerkezete	33
5.3. A rezonancia görbék mikrohullámú gerjesztés okozta kiszélesedése . .	34
5.4. A Rabi-oszcilláció amplitúdójának növekedése	36
5.5. Rezonanciagörbe maximumának eltolódása	37
5.6. Multifotonos elnyelések	39
5.7. Magspinek dinamikája	40
5.8. Magspinek szerepe a megfigyelt jelenségek kialakításában	41
6. Összegzés és kitekintés	43
6.1. Összegzés	43
6.2. Kitekintés	44

1. Bevezetés

Az alacsony dimenziós kondenzált anyagok fizikája egy hatalmas kutatási terület, amely napjainkban is rendkívül gyorsan fejlődik. Különösen fontosak ezen a területen az úgynevezett *van der Waals* heterostruktúrák,[3] amelyek különböző tulajdonságú alacsony dimenziós anyagok rétegeiből épülnek fel. Ezeknek a nanométeres léptékű struktúráknak a vizsgálata, illetve a bennük megfigyelhető jelenségek tanulmányozása olyan új mérőeszközök kifejlesztését igénylik, amelyek nagy térbeli felbontóképességgel rendelkeznek.[12] Félvezető anyagokban előforduló szerkezeti hibáik által megvalósított kvantumbitek - például a gyémántban fellelhető NV centrum[1] - figyelemre méltó képességeket mutattak a nagy felbontású kvantum érzékelés területén.[11] A legújabb kutatási irányzatokban azonban rétegelt *van der Waals* félvezetők által megvalósított ponthiba kvantumbiteket vizsgáltak, mint lehetséges atomi felbontóképességű mérési eszközt.[12] A hexagonális bór-nitridben (hBN) létrehozható negatívan töltött bór-vakancia centrum (VB centrum) a jelenleg ismert egyetlen olyan atomi szerkezet, amely spin kvantumbitként funkcionálhat két-dimenziós anyagokban.[4, 8, 5] A VB centrumokat tartalmazó bór-nitrid anyagban érzékelésre alkalmas atomi vékony fóliákat valósítanak meg, amelyek akár nanoeszközökbe is integrálhatók. Egy ilyen alkalmazást illusztrál az 1.1. ábra, ahol egy ferromágneses CrTe_2 vékonyréteg mágneses terét mérték meg egy ráterített hBN vékonyréteg és a benne található VB centrumok segítségével.[7]

Kvantum jelenségeken alapuló érzékelés esetén nagyon fontos szerepet tölt be a mérést megvalósító kvantum eszköz koherens tulajdonsága. Esetünkben a kvantumbitek állapotait a bór-vakancia elektron spinje adja, amely érzékenyen reagál a mágneses tér változásaira. A mérendő tér mellett azonban számos más effektus is befolyásolja az elektron spint, mint például az anyag rácsszerkezetében megtalálható magspinek, amelyek a spin-spin hiperfinom interakción keresztül csökkentik az elektron spin koherenciaidejét. Az elmúlt évek során számos mérés történt a VB centrum koherenciaidejével kapcsolatban, amelyek ellentmondó eredményekre vezet-



1.1. ábra. Hexagonális bór-nitridben létrehozott bór-vakancia által megvalósított érzékelő fólis mérés. (a) Egy CrTe_2 -pehely optikai képe (sötét régió), amelyet lefed egy hBN pehely (zöld). (b) Fotolumineszcencia kép a CrTe_2 pehelyről. (c) Vázlat az CrTe_2 szórt mágneses térről (lila vonalak). A hBN-ben található kvantumérzékelők mérik az mágneses tér vetületét, amint azt a piros és kék árnyékolás ábrázolja. (d) A CrTe_2 pehely mágneses tértérképe (ΔB_z).[7]

tek. Elméleti számítások és bizonyos kísérletek azt mutatják, hogy a koherencia idő (T_2) nem haladhatja meg a 80 ns-os értéket[6], míg más jelentős fontosságú mérésekben akár 10 μs -ot is meghaladó koherencia időt mértek[4]. Mivel a VB centrum koherencia tulajdonsága közvetlen hatással van a fent említett alkalmazásokra, így az irodalomban tapasztalt ellentmondások feloldása, illetve a tényleges koherencia idő meghatározása a kutatási terület egy nagy jelentőséggel bíró megoldatlan problémája.

A tudományos diákköri munkám egy kiemelt fontosságú tudományos kérdés megválaszolására összpontosított: Többspines effektusok okozhatják-e a VB centrum koherencia idejének a megnövekedését? A kérdés megválaszolása érdekében feltáró kutatásokat folytattam egy valóságű, négy spint - egy triplett elektron spint, illetve három nitrogén magspint - tartalmazó rendszer különböző frekvenciájú és amplitúdójú mikrohullámú gerjesztésének a hatására megfigyelhető jelenségek körében. Fontos megemlíteni, hogy a területen gyakran alkalmazott, úgynevezett *rotating wave* (forgó hullám) közelítést én nem használtam. A szimulációk során a rendszer egzakt időfejlődését végeztem el egy félklasszikus modellben numerikus módszer segítségével.

vel. A mikrohullámhosszú gerjesztés hatására a jelenségek egy színes palettája vált megfigyelhetővé, úgy mint a Rabi oszcilláció, a mikrohullámú gerjesztés hatására a rezonanciagörbék kiszélesedése, rezonancia csúcsok eltolódása, illetve összeolvadása, valamint a többfotonos elnyelődés jelensége. Ezeken felül megvizsgáltam a magspinnek hatását a rezonancia effektusokban. A dolgozatomban megmutatom, hogy a magspinek jelenlétében tiltott elektron spin átmenetek is megengedetté válnak, illetve, hogy a magspinek is koherens oszcillációt mutatnak a rendszer mikrohullámú gerjesztésének hatására. Ez utóbbiból arra következünk, hogy a magspinek, amelyek koherencia ideje általában jóval hosszabb mint az elektron spinnek koherencia ideje, okozhatják a teljes rendszer koherencia idejének a megnövekedését és ez akár az irodalomban közölt ellentmondó eredmények magyarázatául is szolgálhat.

2. Elméleti háttér

A TDK munkám során számos olyan tudást igénylő témakör merült fel, amelyek a reguláris kvantummechanika óra anyagán túlmutattak, így ezeket - az elméleti alapokat egybefoglalva - egy fejezetbe gyűjtöttem.

2.1. A sűrűségoperátor

A dolgozatban vizsgált többspines rendszert kevert állapotokkal tudjuk helyesen leírni, ezért a sűrűségoperátoros formalizmust használtam a numerikus szimulációk során, amelyet alábbiakban ismertetek.

2.2. A sűrűségoperátor bevezetése

A kvantummechanikában, mint minden más tudományterületen nagyon fontos a matematikai eszköztár, és annak helyes használata. A kvantummechanikában a vizsgált rendszer állapotaira egy Hilbert-tér elemeiként tekintünk. Az állapot terén, avagy az adott Hilbert-téren értelmezhetünk operátorokat. A hermitikus operátorokkal fogjuk reprezentálni a fizikai mennyiségeket. Hermitikus operátor lesz például az Hamilton-operátor vagy az impulzus is. A Hilbert-tér vektoraira ($|\psi\rangle \in \mathcal{H}$), és a rajtuk értelmezett operátorokra a Dirac jelölést fogjuk használni, ahol definíció alapján $|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|$. Konvenció szerint az összes vektora a Hilbert-térnek normált lesz:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\| = 1. \quad (2.1)$$

Ha veszünk egy többrészesecske rendszert, akkor az egyes részecskekhez tartozó Hilbert-terek tenzorszorzata fogja megadni a teljes rendszert a következő módon: $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}$. Ekkor értelemszerűen az egyes állapotok felírhatóak, mint $\mathcal{H} \ni |\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$; $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$; $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$.

Nyílt kvantumrendszerek fizikájában a Hilbert-tér $|\psi\rangle$ állapotait nevezzük tiszta állapotoknak [10]. Ugyanakkor, gyakran dolgozunk úgynevezett kevert állapotokkal is, ahol a megfigyelt rendszer több állapotvektorral is jellemezhető ($|\psi_k\rangle$). Ezekhez az állapotokhoz rendelhető egy-egy $q_l \geq 0$ valószínűség, amely meghatározza, hogy

a rendszer mekkora valószínűséggel tartózkodik az egyes állapotokban. Így a rendszerünk állapota a $\{q_l|\psi_l\rangle\}_{l=1}^N$ halmazban szerepel. Ekkor, ha egy mérést végzünk a rendszeren, akkor a következő módon alakul a rendszer:

$$|\psi_l\rangle \longrightarrow \hat{M}_k|\psi_l\rangle = \frac{|\psi_l^k\rangle}{\sqrt{p_{k;l}}}, \quad (2.2)$$

ahol az $\hat{M}_k$ a méréshez tartozó mérési operátor. $p_{k;l} = \langle\psi_l|\hat{M}_k^\dagger\hat{M}_k|\psi_l\rangle$ lesz a valószínűsége annak, hogy k lesz a kimenetel a $|\psi_l\rangle$ állapotban. Tekintettel arra, hogy a $p_{k;l}$ -k valószínűségeket jelentenek, ezért az összegüknek eggyel kell egyenlőnek lennie, tehát ilyenkor a mérési operátorokra vett szummája a Hilbert-téren értelmezett identitás operátort kell kiadnia: $\sum_k \hat{M}_k^\dagger\hat{M}_k = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$.

Ha nem ismerjük azt, hogy melyik állapotban volt kezdetben a rendszer, akkor csak azt tudjuk, hogy akkor is a $\{q_l|\psi_l\rangle\}_{l=1}^N$ halmaz eleme kellett legyen. Ekkor ezt is figyelembe véve a k kimenetel valószínűsége a következőképpen alakul:

$$p_k = \sum_{l=1}^N q_l \cdot p_{k;l} = \quad (2.3a)$$

$$= \sum_{l=1}^N q_l \langle\psi_l|\hat{M}_k^\dagger\hat{M}_k|\psi_l\rangle = \quad (2.3b)$$

$$= \text{Tr} \left[\hat{M}_k^\dagger\hat{M}_k \left(\sum_{l=1}^N q_l |\psi_l\rangle\langle\psi_l| \right) \right]. \quad (2.3c)$$

A (2.3c) egyenletet könnyen le tudjuk egyszerűsíteni, ha bevezetjük a következőt:

$$\hat{\rho} = \sum_{l=1}^N q_l |\psi_l\rangle\langle\psi_l|. \quad (2.4)$$

Így p_k -t leíró egyenlet alakja:

$$p_k = \text{Tr} \left[\hat{M}_k^\dagger\hat{M}_k\hat{\rho} \right]. \quad (2.5)$$

A $\hat{\rho}$ operátort *sűrűségoperátornak* nevezzük, amely ugyanúgy jellemzi az adott állapotot, mint az állapotvektor. Ha a mérést elvégeztük, akkor a rendszerünk összeáll a

következő halmazbeli vektorokból: $\{p_{l;k}|\psi_l^k\rangle\}_{l=1}^N$, ebből következően a sűrűségmátrix az alábbi alakban írható fel:

$$\hat{\rho}_k = \sum_l = p_{l;k}|\psi_l^k\rangle\langle\psi_l^k| = \quad (2.6a)$$

$$= \sum_l p_{l;k} \frac{\hat{M}_k|\psi_l\rangle\langle\psi_l|\hat{M}_k^\dagger}{\sqrt{p_{k;l}} \cdot \sqrt{p_{k;l}}} = \quad (2.6b)$$

$$= \sum_l \frac{q_l}{p_k} \hat{M}_k|\psi_l\rangle\langle\psi_l|\hat{M}_k^\dagger = \quad (2.6c)$$

$$= \frac{\hat{M}_k\hat{\rho}\hat{M}_k^\dagger}{p_k} = \quad (2.6d)$$

$$= \frac{\hat{M}_k\hat{\rho}\hat{M}_k^\dagger}{\text{Tr}[\hat{\rho}\hat{M}_k^\dagger\hat{M}_k]}. \quad (2.6e)$$

Könnnyen belátható, hogy a sűrűségoperátor spurja egységnyi ($\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$), valamint hermitikus ($\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$). Ezen formalizmussal megfogalmazva a tiszta állapotok $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ alakban írhatóak fel.

2.3. A sűrűségoperátor dinamikája

A többspines rendszert mikrohullámú gerjesztés alatt megfigyelhető dinamikáját szeretnénk tanulmányozni, ebből következően az időfejlődés egy elkerülhetetlen része az elméleti áttekintésnek.

Természesen a $|\psi\rangle$ állapotokra felírhatjuk a Schrödinger-egyenletet:

$$|\dot{\psi}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi\rangle. \quad (2.7)$$

Ebből a hullámfüggvény időfejlődését fel tudjuk írni, mint $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$, ahol az $\hat{U}(t)$ propagátort alapvető meggondolásokkal felírhatjuk $\exp\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}\right)$ alakban. Az időfejlődés minden egyes hullámfüggvényre ugyanúgy hat, tehát a $\{q_l|\psi_l\rangle\}_l$ állapotokból és a valószínűségeiből álló halmazból felírhatjuk a belőlük alkotott sűrűségoperátort:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_l q_l |\psi_l(t)\rangle \langle \psi_l(t)|^\dagger = \quad (2.8a)$$

$$= \sum_l q_l \hat{U}(t) |\psi_l(0)\rangle \langle \psi_l(0)| \hat{U}^\dagger(t) = \quad (2.8b)$$

$$= \sum_l q_l \hat{U}(t) |\psi_l(0)\rangle \langle \psi_l(0)| \hat{U}^\dagger(t) = \quad (2.8c)$$

$$= \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(t) = \hat{\rho}(t). \quad (2.8d)$$

Értelemszerűen a Schrödinger-egyenlet az eredeti formájában nem lesz érvényes a sűrűségoperátoros formalizmus keretein belül, így a $\hat{\rho}$ időderiváltját az alábbiak szerint számoljuk ki:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) = \frac{\partial}{\partial t} \sum_l q_l |\psi_l(t)\rangle \langle \psi_l(t)|^\dagger = \quad (2.9a)$$

$$= \sum_l q_l \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi_l(t)\rangle \right) \langle \psi_l(t)| + |\psi_l(t)\rangle \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_l(t)| \right) \right] = \quad (2.9b)$$

$$= \sum_l q_l \left[(-i/\hbar) \hat{H} |\psi_l(t)\rangle \langle \psi_l(t)| + |\psi_l(t)\rangle \langle \psi_l(t)| (i/\hbar) \hat{H} \right] = \quad (2.9c)$$

$$= -i \left[\hat{H} \left(\sum_l q_l |\psi_l(t)\rangle \langle \psi_l(t)| \right) + \left(\sum_l q_l |\psi_l(t)\rangle \langle \psi_l(t)| \right) \hat{H} \right] = \quad (2.9d)$$

$$-i \left(\hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H} \right) = -i \left[\hat{H}; \hat{\rho} \right] = \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t}. \quad (2.9e)$$

A levezetés során felhasználtuk, hogy az adjungálásban a komplex számokat konjugálni kell, felhasználva, hogy $\langle \psi | \hat{H} = i \langle \psi |$. A (2.9e) összefüggést Liouville-von Neumann egyenletnek nevezzük.

Látható, hogy nagyon hasonló a Schrödinger-egyenlethez, hiszen a vizsgált rendszer időfejlődése írható le vele. Az egyenlet a Gorini–Kossakowski–Sudarshan–Lindblad egyenletnek, avagy a mester-egyenletnek a speciális esete. A Schrödinger-egyenletnél egy sokkal általánosabb időbeli evolúciót ír le, tekintettel arra, hogy nem csak a tiszta állapotokat képes kezelni - a Schrödinger-egyenlettel ellentétben -, hanem komplex-szebb, kevert állapotokkal is képes operálni.

2.4. A posztulátumok átfogalmazása

A Schrödinger-egyenlettel dolgozva ki lehetett jelteni négy kvantummechanikai posztulátumot. Ezek továbbra is érvényben fognak maradni, csak kicsit át kell őket fogalmazni, hogy a formalizmus helyes legyen.

Állapottér

Ha tiszta állapotokkal dolgozunk, akkor az állapotokat egy $\mathcal{H}$ Hilbert-tér elemeként értelmezzük, azonban ez a kevert állapotokkal foglalkozó leírásmódban más lesz. A Hilbert-téren ható spurral rendelkező operátorok lesznek megfeleltetve az állapotoknak, mely teret $\mathcal{D}$ -vel fogjuk jelölni.

Állapotok

Két vektorokról - melyekre igaz volt, hogy $\langle \psi | \psi \rangle = 1; \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ - át kell térnünk a sűrűségoperátorokra. Egy olyan $\hat{\rho}$ operátor fogja jellemezni a kevert állapotokat, melynek a spurja eggyel egyenlő, és pozitív definit ($\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1; \hat{\rho} > 0$).

Belső szorzás

Míg a tiszta állapotoknál hermitikus skaláris szorzásként vezettük be az állapotok Hilbert terén a belső szorzatot, addig a $\mathcal{D}$ tér elemeire a következő művelet lesz ennek megfelelője:

$$f(\hat{A}; \hat{B}) = \text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{B}) \quad \forall \hat{A}; \hat{B} \in \mathcal{D} \quad (2.10)$$

Kiterjesztés

Ezen a posztulátumon nem szükséges változtatni, matematikailag ugyanolyan formában történik a tér kiterjesztése mind a két formalizmus esetében, a tenzorszorzás alkalmazásával ($\otimes$).

Dinamika, evolúció

Az állapotok dinamikáját leíró egyenlet a Schrödinger-egyenlet volt a tiszta állapotoknál, és belőle a (2.9.) egyenletben látható levezetéssel megkaphatjuk a Liouville-von Neumann egyenletet, amely a $\hat{\rho}$ operátor időfejlődését írja le.

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}; \hat{\rho}] \quad (2.11)$$

Méréselmélet

A méréselméleti posztulátum alapján, ha egy $|\psi\rangle$ állapotot megmérünk, akkor egy mérési operátort hattathatunk az állapotra a következő módon:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \frac{\hat{M}|\psi\rangle}{\sqrt{p}} \quad (2.12)$$

A fenti kifejezés a következőre módosul:

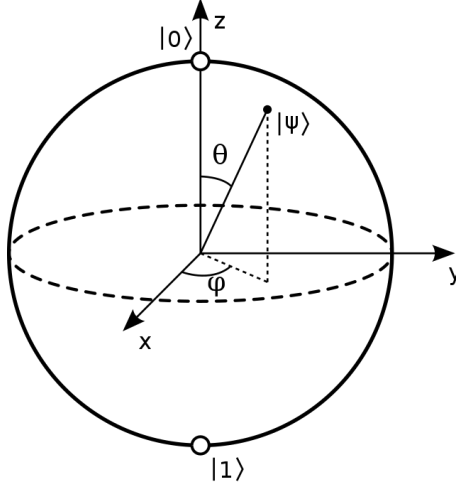
$$\hat{\rho} \longrightarrow \frac{\hat{M}\hat{\rho}\hat{M}^\dagger}{\sqrt{p}} \quad (2.13)$$

2.5. A Bloch-gömb

A Bloch-gömb egy matematikai egyszerűsítő eszköz, melyet arra tudunk használni, hogy a kétdimenziós Hilber-terek állapotait vizualizáljuk. A gömb felülete reprezentálja a tiszta állapotokat, míg a gömb belseje a kevert állapotokat. A Z tengelyt választva kvantálási tengelynek kinevezhetjük a gömb északi pólusát az $\hat{S}_z$ spinoperátor $|0\rangle$ sajátállapotának, a délit pedig a $|1\rangle$ állapotnak. A (2.1.) ábra alapján látható, hogy fel lehet koordinátázni a tiszta állapotokat a két sajátállapot segítségével:

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle. \quad (2.14)$$

Természetesen a fenti összefüggés $\theta = 0$ meg $\theta = \pi$ esetben visszaadja a $|0\rangle$ és $|1\rangle$ sajátállapotokat. De ha $\theta = \frac{\pi}{2}$ és $\varphi = 0$ szögek kerülnek az egyenletbe, akkor az



2.1. ábra. A Bloch-gömb brázolása

állapotvektorra a következő eredményt fogjuk kapni:

$$|\psi\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (2.15)$$

Ezt az állapotot nevezzük el $|+\rangle$ -nak:

$$|+\rangle := \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Ugyanígyen módon vezessük be az $|-\rangle$ rövidítést is, a $\varphi = \pi$ esetre:

$$|-\rangle := \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

A $|+\rangle$ és a $|-\rangle$ az $\hat{S}_x$ operátor sajátállapotai, tehát látható, hogy a Z tengely önkényes megválasztása nem befolyásolt semmit, mivel egy egyszerű koordinátatranszformációval könnyen át lehetne számolni a kettő között. [10]

A Bloch-gömb belsejében helyezkednek el a kevert állapotok, illetve fontos megemlíteni az origót, mint egy kiemelt pontját az állapottérnek. Az origó reprezentál egy magas hőmérsékletű termikus állapotot [9], amikor a rendszer minden állapotban ugyanolyan valószínűséggel található meg. Ha a rendszer T hőmérsékleten van, akkor az úgynevezett *Gibbs-egynesúlyi* állapot sűrűségmátrixa a következő alakot

ölti:

$$\hat{\rho}_T = N e^{-\beta \hat{H}}, \quad (2.16)$$

ahol $\beta = \frac{1}{k_B T}$ és N pedig a normálási faktor. A Hamilton-operátor projektorokra felbontva $\hat{H} = \varepsilon_{|0\rangle} |0\rangle\langle 0| + \varepsilon_{|1\rangle} |1\rangle\langle 1|$ alakban írható fel, amely alapján a termikus állapot sűrűségoperátora kiszámítható:

$$\hat{\rho}_T = \frac{1}{1 + e^{-\beta \Delta E}} (|0\rangle\langle 0| + e^{-\beta \Delta E} |1\rangle\langle 1|). \quad (2.17)$$

$T \rightarrow \infty$ határesetben:

$$\hat{\rho}_\infty = \frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|), \quad (2.18)$$

amely a Bloch-gömb origójában lévő állapot.

2.6. A "rotating wave" közelítő módszer [2]

A kvantummechanikai számítások során sokszor közelítő módszereket kell használnunk, többek között lehet példaként említeni a Born-Oppenheimer, vagy Hartree-Fock közelítést. A kvantumoptika egyik fontos közelítő metódusa a *Rotating Wave Approximation (RWA)* - magyarra fordítva *forgó hullám közelítés*. Ezen közelítés bevezetésére azért volt szükség, mert az időben periódikusan változó tereknek kitett kvantumrendszerek időfejlődését nem lehet egzaktul megadni.

A dolgozatban használt szimulációs módszerek túljuttatnak a RWA közelítésen, így ezen eljárás megértése nem szükséges a numerikus modell bevezetéséhez. Azonban, a szimulációs eredmények értelmezésben nagy segítséget jelentett a RWA közelítésből levezett jelenségek, például a Rábi oszcilláció, áttekintése. A RWA közelítésen tárgyalása a TDK munkám eredményeinek jobb megkéretést szolgálja, így a dolgozat szerves részét képezi.

A RWA azzal a feltevessel dolgozik, hogy a megfigyelt rendszer effektív Hamilton-operátorából a nagyon gyorsan oszcilláló tagokat elhanyagolhatjuk, mivel azok időátlaga gyorsan lecseng,

$$\exp(\pm i n \varphi) \longrightarrow \int \exp(\pm i n \varphi) d\varphi = \frac{\exp(\pm i n \varphi)}{\pm i n}. \quad (2.19)$$

Ha nagy n -eket veszünk, akkor a hányados nullához fog tartani. Emellett egy másik közelítést is tehetünk, melyhez az Euler-formulát tudjuk használni:

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi = \quad (2.20a)$$

$$= \cos \varphi + 2i \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} \implies \quad (2.20b)$$

$$2 \cos \varphi = e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} \quad (2.20c)$$

$$2 \cos \varphi = e^{i\varphi} (1 + e^{-2i\varphi}) \approx e^{i\varphi}. \quad (2.20d)$$

Tehát egy oszcilláló tag a Hamilton operátorban $e^{i\varphi}$ taggal közelíthető, amely segítségével analitikus kifejezésekhez juthatunk egyszerű időfüggő terek esetén. A (2.20d) egyenletben elhanyagolhattuk a negatív exponensű tagot, ha azonban a (2.19) közelítéssel összevetjük, akkor észrevehetjük hogy RWA-ben alkalmazott közelítés azt jelenti, hogy $n = 2$. Ez kétségeket vethet fel a RWA alkalmazhatóságával kapcsolatban. Ennek ellenére a módszer egy fontos szemléletes képet ad az oszcilláló terekben megfigyelhető jelenségekről.

Az oszcilláló terek okozta időfejlődés megértéséhez elő kell venni a Pauli-mátrixokat, és a kvantummechanika alapfeltevéseit. A két dimenziós vektortéren ható operátorok mátrixrepresentációjának elemei közül kiemelünk három kifejezetten fontos mátrixot, amelyek az $\mathbb{SU}(2)$ (két dimenziós speciális unitér operátorok) csoportnak a generátorai, amely a háromdimenziós forgatások csoportjának fedőcsoportja.

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Ezeket felül bevezetünk újabb mátrixokat, melyek a későbbiekben fontosak lesznek:

$$\hat{\sigma}_+ = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_- = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Ezekkel az újonnan bevezett mátrixokkal felírhatóak kommutátor-relációk:

$$\left[\frac{1}{2}\sigma_3; \sigma_+\right] = \sigma_+, \quad \left[\frac{1}{2}\sigma_3; \sigma_-\right] = -\sigma_-, \quad [\sigma_+; \sigma_-] = \sigma_3. \quad (2.23)$$

Vezessünk be a téren egy bázist:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Az egyszerűség kedvéért egy olyan rendszerre nézzünk példát, amely két energiaszinttel rendelkezik, egy alapállapottal - amelyre $|0\rangle$ vektorként fogunk mostantól hivatkozni - és egy gerjesztett állapottal, amelyet értelemszerűen a $|1\rangle$ jelölhetők. Ez esetben a Hamilton-operátor felírható a következő alakban:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Az energiakülönbséget ($\Delta = E_1 - E_0$) beleírva az operátorba az alábbi eredményre jutunk:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{E_0 + E_1}{2} - \frac{E_1 - E_0}{2} & 0 \\ 0 & \frac{E_0 + E_1}{2} - \frac{E_1 - E_0}{2} \end{pmatrix} = \quad (2.26a)$$

$$= \frac{E_0 + E_1}{2} \mathbb{1}_2 - \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_3. \quad (2.26b)$$

Ha a rendszerre egy periódikus gerjesztést kapcsolunk (például a kétállapotú rendszer kvantálási tengelyére merőleges irányú oszcilláló mágneses teret), akkor a kölcsönhatás egy $A \cos(\omega t + \varphi) \hat{\sigma}_1$ alakot fog követni. Vegyük észre a következőt:

$$\hat{\sigma}_1 |0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{\sigma}_1 |1\rangle = |0\rangle. \quad (2.27)$$

Látható, hogy a $\hat{\sigma}_1$ operátor állapotok közötti átmenetet okoz, így a Hamilton-

operátor kölcsönhatási tagját is figyelembe véve:

$$\hat{H} = -\frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_3 + 2g \cos(\omega t + \varphi)\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & 2g \cos(\omega t + \varphi) \\ 2g \cos(\omega t + \varphi) & \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

A fenti mátrixban g -vel jelöltük a csatolási állandót.

A Hamilton-operátor ismeretében a célunk megoldani a Schrödinger-egyenletet. Sok esetben viszont az egyenlet analitikusan megoldhatatlan, ebből kifolyólag kénytelenek vagyunk közelítő módszereket alkalmazni. A (2.20d.) egyenletben láthattuk, hogy a Euler-formula segítségével hogyan tudtuk egyszerűbb alakba önteni a koszinusz függvényt, tegyük meg ezt a közelítést a $\hat{H}$ -ban is:

$$2g \cos(\omega t + \varphi)\hat{\sigma}_1 \approx \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\omega t + \varphi)} \\ e^{-i(\omega t + \varphi)} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

A fenti mátrixot felhasználva már könnyen fel lehet írni a közelített Hamilton-operátort:

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & 2g \exp(i(\omega t + \varphi)) \\ 2g \exp(i(\omega t + \varphi)) & -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

A cél továbbra is Schrödinger-egyenlet megoldása, azonban most már a $\hat{H}'$ szerepel majd benne.

Az operátort fel lehet írni három külön mátrix szorzataként:

$$\begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & 2g \exp(i(\omega t + \varphi)) \\ 2g \exp(i(\omega t + \varphi)) & -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} = \quad (2.31a)$$

$$= \begin{pmatrix} \exp\left(i\frac{\omega t + \varphi}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\frac{\omega t + \varphi}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2}g & \\ g & \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp\left(-i\frac{\omega t + \varphi}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(i\frac{\omega t + \varphi}{2}\right) \end{pmatrix}. \quad (2.31b)$$

Vezessük be a hullámfüggvény transzformáltját:

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \exp\left(-i\frac{\omega t + \varphi}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(i\frac{\omega t + \varphi}{2}\right) \end{pmatrix} \cdot \psi \quad (2.32)$$

A módosított hullámfüggvényre felírva a Schrödinger-egyenletet, illetve a számítási könnyebbségek végett mondjuk azt rövid időre, hogy $\hbar = 1$:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta - \omega}{2}g & g \\ g & \frac{\Delta - \omega}{2} \end{pmatrix} \tilde{\psi} \quad (2.33)$$

Rezonáns gerjesztésről beszélünk, amikor a $\omega = \Delta$, tehát a két energiaszint közötti átmenet éppen $\hbar\omega$. Vizsgáljuk meg részletesebben ezt az esetet:

$$\Delta = \omega \implies i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix} \tilde{\psi} = g\hat{\sigma}_1\tilde{\psi} \quad (2.34)$$

A $\tilde{\psi}(t)$ időfejlődést bizonyítás nélkül felírjuk:

$$\tilde{\psi} = e^{-igt\hat{\sigma}_1}\tilde{\psi}(0) = \begin{pmatrix} \cos(gt) & -i\sin(gt) \\ -i\sin(gt) & \cos(gt) \end{pmatrix} \tilde{\psi}(0) \quad (2.35)$$

Amelyből levezethető a (2.32.) egyenlet felhasználásával a $\psi(t)$:

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \cos(gt) & -i\sin(gt) \\ -i\sin(gt)e^{-i(\omega t + \varphi)} & \cos(gt)e^{-i(\omega t + \varphi)} \end{pmatrix} \psi(0) \quad (2.36)$$

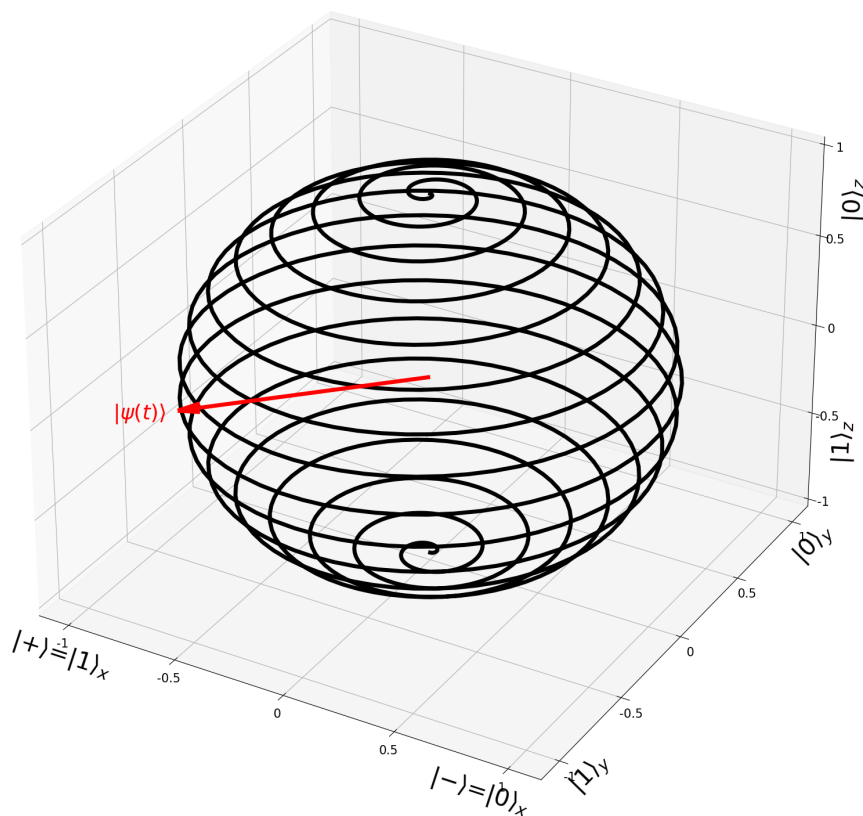
Kezdeti állapotnak természetesen a $\psi(0) = |0\rangle$ alapállapotot adjuk meg, így az időfejlődést a következő formában tudjuk felírni:

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \cos(gt) \\ -i\sin(gt)e^{-i(\omega t + \varphi)} \end{pmatrix} = \cos(gt)|0\rangle + e^{-i(\omega t + \varphi + \pi/2)}\sin(gt)|1\rangle \quad (2.37)$$

Az egyenletből könnyen kiolvasható az eredmény, hogy a $\psi(t)$ a két állapot kö-

zött oszcillál, ezt koherens oszcillációnak, vagy Rabi oszcillációnak nevezzük, amely kifejezetten fontos szerepet játszik a kvantumoptikában, illetve dolgozatban tárgyalt jelenségek megértésében. Fontos megemlíteni, hogy a $|0\rangle$ és $\psi(0) = |1\rangle$ állapotok közti oszcilláción felül a $\psi(t)$ állapot vektor a Bloch-gömb tengelye körül is forog ω szögsebességgel, így spirál mozgást ír le a Bloch-gömb felszínén, lásd 2.2 ábra.

Bloch-gömbön való mozgása az állapotnak



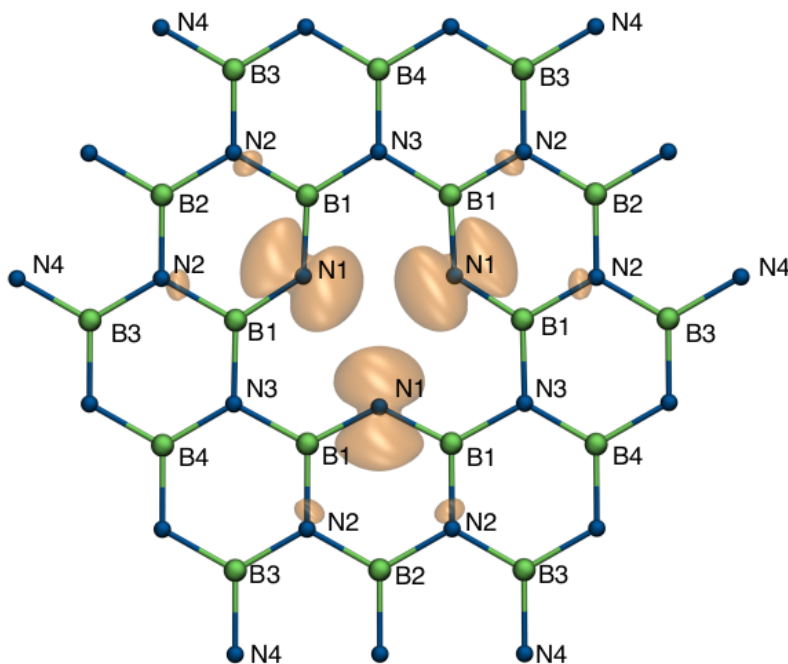
2.2. ábra. Az állapotok alakulása a Bloch-gömbön a Rábi oszcilláció során. Kezdetben a rendszer a $|0\rangle$ állapotot vette fel, majd a gerjesztést rákapcsolva spirális úton haladt át a rendszer másik sajátállapotába, a $|1\rangle$ -be. Ekkor az X és az Y tengelyre vett vetülete az állapotvektornak oszcillál.

A Rabi oszcilláció jelenség a szimulációk eredményének tárgyalása és megértése szempontjából kulcsfontosságú szerepet tölt be. Azonban a tudományos diákköri munkám során használt szimulációs módszer nem alkalmazta a RWA-t, így a Rabi-oszcilláció mellett olyan jelenségeket is megfigyeltem, amelyek a most tárgyalt formalizmussal nem írható le. Ezeket részletes tárgyalom az eredmények részben.

3. Szimulációs módszer

3.1. A fizikai rendszer

A grafit atomi szerkezetének felfedezését követően jelentős figyelem fordult a réteges kristályok kutatására. A hexagonális bór-nitrid (hBN) [13] egy lamináris úgynevezett van der Waals-anyag, amely bizonyos gyártási eljárásokkal alkalmassá tehető két dimenziós félvezető fizikai jelenségek megfigyelésére. A hBN-ben az utóbbi években felfedezett negatívan töltött bórvakancia centrum (VB-centrum) egy olyan fizikai objektum, amely szobahőmérsékletű egyfoton emissziós rendszereként és spin kvantumbitként is funkcionálhat, így nagy jelentőséggel bír. A különlegessége a VB-centrumnak az, hogy a környező nitrogén és bór atommagok mind spinnel rendelkeznek. Ezek a magspinek jelentősen befolyásolják az atom eltávolítását követően hátramaradt elektron energiaszintjeinek finom és hiperfinom szerkezetét.



3.1. ábra. A vizsgált VB centrum spin sűrűsége. A kutatás során az N1-es első szomszéd magspineken túli szekunder magspinek járulékát elhanyagoltuk, azonban természetesen további effektusok léphetnek fel, ha további atommagokat is figyelembe veszünk.

A (3.1.) ábrán látható a rendszer szerkezetének sematikus vázlata. A bór atom eltávolítását követően nitrogén lógó kötések maradnak hátra, amelyek új elektron állapotokat hoznak létre az anyag tiltotsávjában. A magas D_{3h} szimmetria miatt degenerált elektron állapot is létre jönnek, amelyek a rendszer negatív töltésállapotában épp úgy töltődnek be, hogy azokon két elektron található azonos spinnel. A VB centrum alapállapota tehát spin triplet ($S=1$). Az ehhez az állapothoz tartozó spin sűrűség (a részlegesen betöltött elektron állapotok hullámfüggvényeinek négyzetösszege) látható a 3.1. ábrán. Jól látható, hogy a spin sűrűség a vakancia-centrumhoz legközelebb lévő három nitrogén atommagon lokalizálódik (N1 magok az ábrán). Az alkalmazott modellben ezeknek a magspineknek az elektron spinnel vett interakciójára szorítjuk le a megfigyelt kölcsönhatásokat. Az egyszerűség kedvéért csak a nitrogén ^{14}N izotópját, illetve annak $S = 1$ triplett spinjét vesszük számításba, ugyanis ez az izotóp 99.63% természetes előfordulási valószínűséggel jelenik meg a rácspontokon.

Ahogy azt a fentiekben említettem, a probléma kezelésére sűrűségoperátoros formalizmust használtam, és a Schrödinger-egyenlet megoldása helyett pedig a Liouville-von Neumann-egyenlet numerikus megoldásait kerestem oszcilláló mágneses tér hatása alatt. Erre azért volt szükség, mert a magspinek kezdeti állapotára egy kevert, termikus állapottal írtuk le. Pontosabban, a korábban említett végtelen magas hőmérsékleti limitet tételeztem fel, ahol minden állapot ugyan olyan súllyal szerepel a sűrűségmátrixban. A VB centrum elektronspinje azonban optikai úton inicializálható a triplet spin $m_S = 0$ állapotába, hasonlóan az gyémánt beli NV centrumhoz.

3.2. A rendszer Hamilton-operátora

Elsőként vegyük egy elektronnak a hullámfüggvényét, amely egy az alábbi formában írhatjuk fel:

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

ahol az $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ a spinfüggő rész. Dirac jelölésben:

$$|\psi\rangle = |\vec{r}\rangle \otimes |\sigma\rangle \quad (3.2)$$

Mivel a hullámfüggvényt szét tudtuk bontani spin- és helyfüggésre, így a Hamilton-operátor is szeparálható az egyes változók szerinti függésre. Tegyük fel, hogy a $\varphi(\vec{r})$ függés ismert, ekkor a teljes rendszert leíró Hamilton-operátorból megkapható a tisztán spinfüggő rész a következő módon:

$$\hat{H}(\vec{r}; \sigma) \longrightarrow \hat{H}_{\text{spin}} \quad (3.3a)$$

$$\hat{H}_{\text{spin}} = \langle \vec{r} | \hat{H}(\vec{r}; \sigma) | \vec{r} \rangle. \quad (3.3b)$$

A dolgozatban vizsgált modellben összesen négy spin szerepel, a VB centrum tripllett elektron spinje, illetve a három első szomszéd ^{14}N magspin, amelyek szintén tripllett spinállapottal rendelkeznek. A Hilbert-tér, melyen az operátorok hatnak - köztük a Hamilton is - $3^4 = 81$ dimenziós.

A rendszer teljes *időfüggő* spin Hamilton-operátorát össze tudjuk állítani a következő tagok segítségével:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_{ZFS}^{(e^-)} + \hat{H}_{zeeman}^{(e^-)}(t) + \sum_i^3 \left(\hat{H}_{zeeman}^{(nuc,i)}(t) + \hat{H}_{QS}^{(nuc,i)} + \hat{H}_{hyperfine}^{(e^- - nuc,i)} \right) \quad (3.4)$$

Ahol az egyes tagok a következőket jelentik:

- $\hat{H}_{ZFS}^{(e^-)}$ - *Zero Field Splitting* (zérus tér felhasadás).
- $\hat{H}_{zeeman}^{(e^-)}(t)$ - Az elektron Zeeman kölcsönhatásban résztvevő tagja.
- $\hat{H}_{zeeman}^{(nuc,i)}(t)$ - Az i -k magspin Zeeman kölcsönhatása.
- $\hat{H}_{QP}^{(nuc,i)}$ - A i -ik magspin kvadrupol felhasadása.
- $\hat{H}_{HFS}^{(e^- - nuc,i)}$ - Hiperfinom kölcsönhatás az i -ik magspinnel.

A Hamilton-operátor egyes tagjait az alábbiak szerint adhatjuk meg.

Zérus tér felhasadás

Ez a kölcsönhatás akkor jelenik meg, ha a rendszerben kettő vagy több párosítatlan elektron van, tehát a $S \geq 1$. A Hamilton-operátora felírható az alábbi formában:

$$\hat{H}_{ZFS} = \vec{\hat{S}} \hat{D} \vec{\hat{S}} = \quad (3.5a)$$

$$= D_x \hat{S}_x^2 + D_y \hat{S}_y^2 + D_z \hat{S}_z^2 = \quad (3.5b)$$

$$= D \left(\hat{S}_z^2 - \frac{S(S+1)}{3} \mathbb{1}_3 \right) + E \left(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2 \right), \quad (3.5c)$$

ahol $D = 3D_x/2$ és $E = (D_x - D_y)/2$. A vizsgált rendszerünk, a bór-nitridbeli VB(-) esetében $D = 3479$ MHz, illetve $E = 0$ MHz.

Zeeman-tagok

A Zeeman effektus akkor figyelhető meg, ha a külső $\vec{B}$ térbe helyezzük a rendszert, amely szintén újabb energiaszint felhasadásokat okoz. Jelen esetben a külső mágneses térnek két komponense van, a) egy statikus B_0 tag a kvantálási tengellyel párhuzamos irányban, illetve b) egy a statikus mágneses tér irányára merőleges időfüggő tag $B(t)$. A kvantálási tengely konvenció szerint a z tengely, míg az oszcilláló tér x tengely irányú.

$$\hat{H}_{Zeeman}^{(e^-)}(t) = g_l \mu_B \hat{S}_z B_0 + g_l \mu_B \cos(\omega t) \hat{S}_x B_A, \quad (3.6)$$

ahol g_l az elektron Landé g-factora, μ_B a Bohr magneton, ω és B_A rendre az oszcilláló mágneses tér frekvenciája és amplitúdója.

Az ^{14}N magspinekre ható Zeeman tagok nagyon hasonlítanak az elektronoknál fellépő effektusra. Az egyetlen különbség az, hogy a szorzó tényezőt az atommag μ_N mag magnetonja, illetve a nitrogén 14-es izotópjának g_N Landé g-factora adja. A Hamilton-operátor:

$$\hat{H}_{Zeeman}^{(nuc,1)}(t) = g_N \mu_N B_0 \hat{S}_z + g_N \mu_N \cos(\omega t) \hat{S}_x B_A \quad (3.7)$$

Kvadrupol felhasadás

A triplett magspinek esetében előjön a kvadrupol momentumok hatása is, amelyekhez tartozó Hamilton-operátor a következő formában írható fel,

$$\hat{H}_{QP}^{(nuc,1)} = Q_{14N} \cdot \left(\hat{S}_z^2 - \frac{2}{3} \mathbb{1}_3 \right) \quad (3.8)$$

ahol Q_{14N} -vel jelöltük a kvadrupol-momentumát a nitrogén atommagoknak.

Hiperfinom felhasadás

A hiperfinom felhasadás Hamilton-operátorát is fel tudjuk írni:

$$\hat{H} = g_l \mu_B g_N \mu_N \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \left(\frac{\vec{S}_1(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{S}_2(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \vec{S}_1 \vec{S}_2 \right) \quad (3.9)$$

$$H_{HFS}^{(nuc,i)} = \langle \psi(\vec{r}; \sigma) | \hat{H}_{dip-dip} | \psi(\vec{r}; \sigma) \rangle = \quad (3.10a)$$

$$= \dots = \vec{S}_{el} \hat{A} \vec{S}_i = \quad (3.10b)$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{S}_x^{(el)} & \hat{S}_y^{(el)} & \hat{S}_z^{(el)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{xx} & A_{xy} & A_{xz} \\ A_{yx} & A_{yy} & A_{yz} \\ A_{zx} & A_{zy} & A_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{S}_x^{(i)} \\ \hat{S}_y^{(i)} \\ \hat{S}_z^{(i)} \end{pmatrix} \quad (3.10c)$$

A (3.10b.) egyenletben szereplő $\hat{A}$ mátrixot hiperfinom tenzornak nevezzük. Ha bevezetjük az $\hat{S}_+$ és $\hat{S}_-$ jelöléseket az $\hat{S}_x$ és $\hat{S}_y$ operátorokból, és elvégezzük a mátrix-szorzást, akkor megkapjuk az általunk felhasznált Hamilton-operátorát a hiperfinom felhasadásnak:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{HFI}^{(e^- - nuc,1)} = & \left(iA_{xy} (\hat{S}_- - \hat{S}_+) + A_{xx} (\hat{S}_- + \hat{S}_+) + 2A_{xz} \hat{S}_z \right) \otimes (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) + \\ & \left(A_{yy} (\hat{S}_+ - \hat{S}_-) + A_{xy} (\hat{S}_- + \hat{S}_+) + 2iA_{yz} \hat{S}_z \right) \otimes (\hat{S}_- - \hat{S}_+) + \\ & 2 \cdot \left(iA_y (\hat{S}_- - \hat{S}_+) + A_{xz} (\hat{S}_- + \hat{S}_+) + 2iA_{zz} \hat{S}_z \right) \otimes \hat{S}_z \end{aligned} \quad (3.11)$$

A hiperfinom tenzorok paramétereit az irodalomból vettük.[8]

Végezetül fontos megemlíteni, hogy a fent definiált időfüggő spin Hamilton-operátor segítségével a vizsgált rendszer egy félklasszikus közelítését tudjuk elvégezni, ugyanis az elektromágneses mezőt nem kvantáltuk. Ez a közelítés a teljesen kvantum leírás úgynevezett „erőtér” határmenetében lesz érvényes, amikor az elektromágneses tér már annyi fotont tartalmaz, hogy néhány foton elnyelése, vagy emissziója lényegében nem befolyásolja a tér tulajdonságait.

3.3. A felhasznált algoritmus

Érdemes arra is kitérni, hogy a rendszer időfejlődését milyen algoritmussal számítjuk ki. Tekintettel arra, hogy a Hamilton-operátor tartalmaz egy olyan tagot, amely időben oszcillál, így az egész Hamilton-operátor időfüggő lesz. Az időfüggés miatt nem tudjuk felírni a propagátort, így analitikus megoldást nem tudunk találni az egyenletekre, ezért kell numerikus módszerekhez folyamodnunk. A beprogramozott algoritmus egzakt időfejlődéssel számol, és egy negyedrendű *Runge-Kutta* metódust használ fel. A módszer alapja, hogy egy adott $y(t)$ időfüggő függvénynek keressük az alakját közelítve. Tudjuk azonban, hogy a mozgásegyenlet milyen alakot ölt, és a kezdeti állapotok ismeretében és egy $h > 0$ lépési köz meghatározásával közelítve meg tudjuk kapni a függvény alakját.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h, \quad (3.12)$$

$$t_{n+1} = t_n + h,$$

ahol a k_n -ek a következők:

$$k_1 = f(t_n; y_n) \quad (3.13a)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}; y_n + h\frac{k_1}{2}\right) \quad (3.13b)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}; y_n + h\frac{k_2}{2}\right) \quad (3.13c)$$

$$k_4 = f(t_n + h; y_n + hk_3). \quad (3.13d)$$

Ha ismert y_0, t_0 és $f(y; t)$, akkor a közelítő alakja és menete kiszámítható az $y(t)$ függvénynek.

Esetünkben a megoldandó egyenlet a Liouville-von Neumann-egyenlet, és a sűrűségoperátorra oldjuk meg az előző részben definiált Hamiltoni segítségével. A kezdeti opertor összeáll az alábbiak szerint:

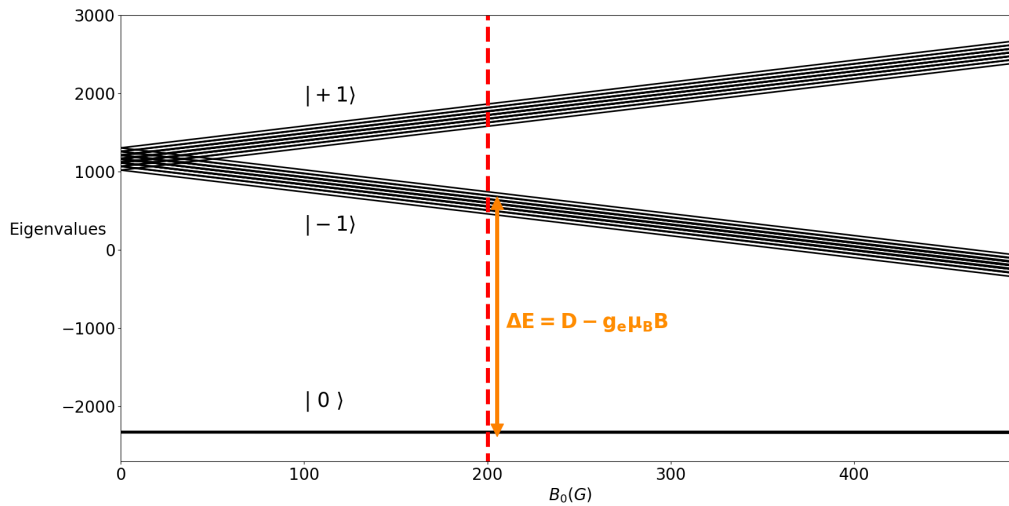
$$\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{e(-)} \otimes \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \otimes \hat{\rho}_3 \quad (3.14)$$

$$\hat{\rho}_{el} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2 = \hat{\rho}_3 = \frac{1}{3} \cdot \mathbb{1}_3.$$

A szimulációk során az elektron, illetve a magspin állapotok bizonyos operátorok, tipikusan S_z , néha S_x , sajátállapotaira vett vetületét iratam ki, majd ezeket időátlagoltam. A kutatás során a időátlagok változását vizsgáltam a gerjesztő frekvencia és amplitúdó függvényében.

4. Eredmények I. - A statikus rendszer energia szintjeinek meghatározása

Elsőként a statikus esetet vizsgáltam, amikor az oszcilláló mágneses tér amplitúdóját nullának vettem. Ilyen esetben a Hamilton-operátor diagonalizálható és rendszer saját értékeit és saját állapotait kaphatjuk, amelyekből fontos információkhoz juthatunk a várható spin átmentekkel kapcsolatban. Ebben a részben tehát Hamilton-operátor sajátértékeit vizsgálom, illetve azok alakulását a spin Hamilton különböző paramétereinek függvényében.



4.1. ábra. A sajátértékek felhasadása a mágneses tér megjelenését követően. Látható, hogy a két fő ág - mely megjelent a *ZFS* következményeként - több kisebb energiaszintre szakadt fel. Mind a két ágon hét-hét felhasadt energiaszint jelent meg.

4.1. A magspinek hatása az energiaszintek felhasadására

A rendszerből az atommagok hatását figyelmen kívül hagyva csak a triplet elektronspinre ható interakció marad bent, amely $B = 0$ estén a *ZSF* kölcsönhatás. $B \neq 0$ esetre a Zeeman effektus további felhasadást hoz létre, és a mágneses mező nagyságának függvényében két energia ágra hasítja a $| -1 \rangle$ és a $| +1 \rangle$ állapotokat. A két

állapot között energiaszint különbség:

$$\Delta E(|-1\rangle; |+1\rangle) = 2g_l\mu_B B_0. \quad (4.1)$$

A $|0\rangle$ és a $|-1\rangle$ állapotok között különbség pedig az alábbi lesz:

$$\Delta E(|-1\rangle; |0\rangle) = D - g_l\mu_B B_0 \quad (4.2)$$

Számunkra ez az átmenet lesz fontos a későbbiekben. A két ág jól látszik a 4.1. ábrán is. Ha azonban a magspinek kölcsönhatását is számításba vesszük, akkor egy még finomabb szerkezet alakul ki. Minden hozzáadott magspin az állapotokat három darab újabbra hasítja fel. Mivel a rendszer D_{3h} szimmetriával rendelkezik és a magspinek hiperfinom kölcsönhatás erőssége megegyezik, ezért az összes felhasadás azonos energiakülönbséggel jár, ebből következően - mind a három környező magspin kölcsönhatását számításba véve - lesznek degenerált állapotok, egy energiaszinthez, több lehetséges állapot fog tartozni.

A 4.2. és a 4.3. ábrákon látható, hogy milyen módon hasadtak fel a magspinek által az állapotok, és hogy hány-szoros degenerációkat okoz ez. Az 1. táblázat az elektron spin $|-1\rangle$ -es állapotához tartozó ágakban szereplő állapotokat listázza.

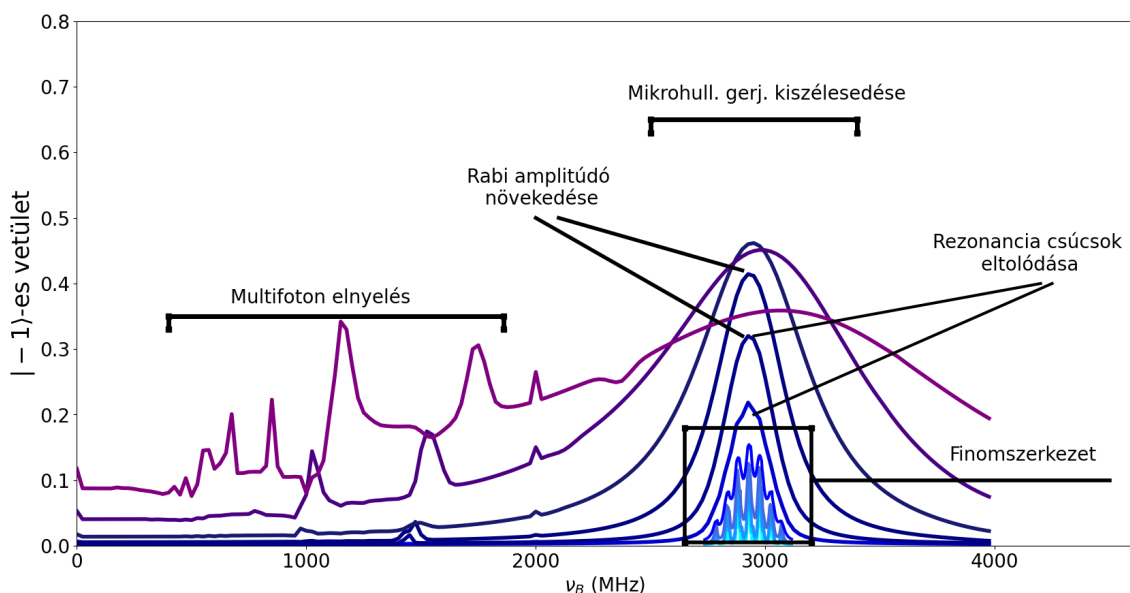
Fontos megemlíteni, hogy a kvadrupólus felhasadás, illetve nukleáris Zeeman felhasadás miatt az energiaszintek még tovább hasadnak és a hiperfinom szerkezetnél is finomabb energia szint szerkezetéhez vezetnek. Ezen effektusok elhanyagolható hatása miatt ezt már nem taglalom

1. táblázat. A hiperfinom felhasadt ágakban található állapotok. Az ágak $\sum_i S_z^{(nuc,i)}$ szerint csoportosíthatók.

height	Állapotok	$2x^{14}N$	$3x^{14}N$	$\sum_i \hat{S}_z^{nuc,i}$
$0x^{14}N$	$1x^{14}N$	$2x^{14}N$	$3x^{14}N$	$\sum_i \hat{S}_z^{nuc,i}$
$ -1\rangle$		$ -1; -1; -1\rangle$	$ -1; -1; -1; -1\rangle$	-3
			$ -1; -1; -1; 0\rangle; -1; -1; 0; -1\rangle; -1; 0; -1; -1\rangle$	-2
	$ -1; -1\rangle$	$ -1; -1; 0\rangle; -1; 0; -1\rangle$	$ -1; -1; 0; 0\rangle; -1; 0; -1; 0\rangle$	-1
			$ -1; -1; -1; +1\rangle; -1; 0; 0; -1\rangle;$	
			$ -1; -1; +1; -1\rangle; -1; +1; -1; -1\rangle$	
			$ -1; 0; 0\rangle; -1; -1; +1; 0\rangle,$	
	$ -1; 0\rangle$	$ -1; 0; 0\rangle; -1; -1; +1\rangle; -1; +1; -1\rangle$	$ -1; +1; -1; 0\rangle; -1; -1; 0; +1\rangle; -1; 0; -1; +1\rangle;$	0
			$ -1; +1; 0; -1\rangle; -1; 0; +1; -1\rangle$	
	$ -1; +1\rangle$	$ -1; +1; 0\rangle; -1; 0; +1\rangle$	$ -1; 0; 0; +1\rangle; -1; -1; +1; +1\rangle,$	1
			$ -1; +1; -1; +1\rangle; -1; +1; 0; 0\rangle,$	
		$ -1; +1; +1\rangle$	$ -1; 0; +1; 0\rangle; -1; +1; +1; -1\rangle$	2
			$ -1; +1; 0; 0\rangle; -1; 0; +1; 0\rangle; -1; +1; +1; 0\rangle$	
			$ -1; +1; +1; +1\rangle$	3

5. Eredmények II. - A gerjesztett rendszer dinamikája

A kutatás során a vizsgált mikrohullámú gerjesztésnek kitett négyspines rendszer valós idejű, egzakt időfejlődését tanulmányoztam. Amint azt a bevezetőben részleteztem, a mikrohullámú mágneses tér átmeneteket okoz a spinállapotok közt. Ezek az átmenetek azonban nem kizárólag a gerjesztési frekvencia és az energiaszintek különbségének megfelelő rezgési frekvencia egyezése esetén volt megfigyelhető, hanem ettől elérő frekvenciákon is. A szimulációkat minden esetben $B_z = 200$ Gauss statikus mágneses tér mellett végeztem.



5.1. ábra. Nagy frekvenciatartományon vizsgált rezonanciagörbék alakulása. A függőleges tengelyen az elektronspin $| - 1 \rangle$ -es állapotára vett vetület időátlagát mutatja. A feltüntetett jelenségeket a dolgozat további alfejezetiben diszkutálom.

A 5.1 ábrán az elektron spin $| - 1 \rangle$ -es állapotra vett vetületének az időátlagát ábrázoltam a gerjesztési frekvencia függvényében, különböző gerjesztési amplitúdók mellett. Jól látható, hogy nem tisztán egy egyszerű Lorenz-görbét adtak a szimulációk, hanem több jelenség is megfigyelhető a képen. Az eredmények tárgyalása során a 5.1. ábrán látható jelenségeken haladok végig és részletesen analizálom a szimulációk eredményét. Ezt követően megvizsgálom a magspinek dinamikáját, illetve a

szerepüket a 5.1. ábrán látható jelenségek kialakításában.

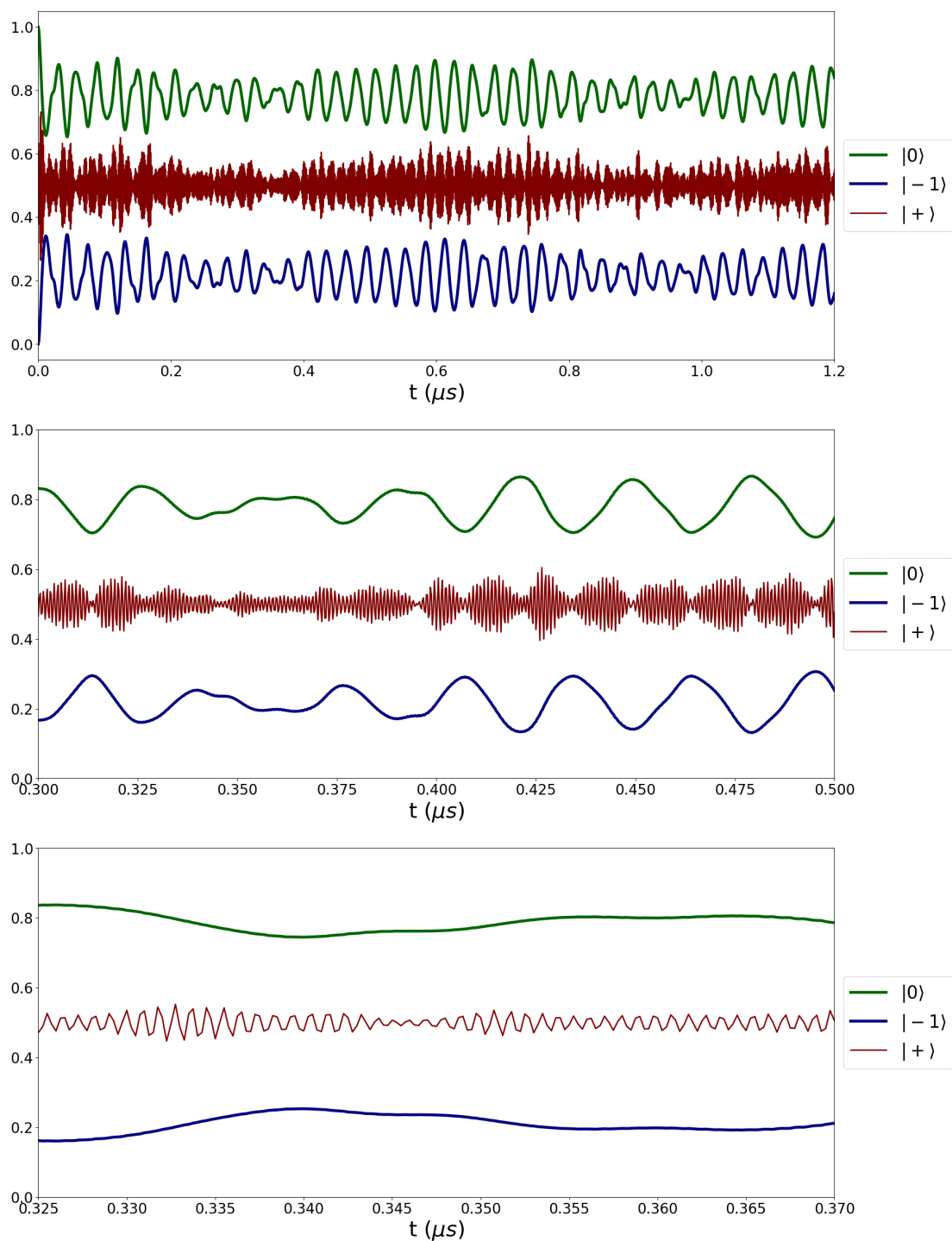
5.1. Rabi-oszcilláció

A statikus mágneses mező felhasította a $|\pm 1\rangle$ állapotokat két külön állapotra. Korábban a 4.1. ábrán szemléltettük a Hamilton-operátor sajátértékeinek, tehát az energiaszintek alakulását a külső mágneses tér hatására. Látható, hogy mind a két ágon több érték jelenik meg, ezek a hiperfinom kölcsönhatás következményei, hiszen a magspinek is közrejátszanak a bór-vakancia centrum energiaszintjének alakulásában. A vizsgálatok többségében a gerjesztési frekvencia a $|0\rangle$ és a $|-1\rangle$ állapotok közt fellépő energiakülönbséggel lesz rezonáns, a felső ág offrezonáns marad.

A 5.1 ábrán megfigyelt jelenségek kialakításában fontos szerepet játszik a Rabi-oszcilláció, ezért elsőként ezt a jelenséget tanulmányozom a négyspines modellben. A kutatás során 200 G volt a külső állandó mágneses tér. A szimulációkban a mikrohullám gerjesztés amplitúdója $B_A = 16.8\text{ Gauss}$ volt, míg a gerjesztési frekvencia megegyezett az $m_S = -1$ -es ág központi, hétszeresen degenerált állapotának és a $m_S = 0$ -es ág energiájának a különbségével. A gerjesztés hatására az elektron spin állapot projekciói a 5.2. ábrán látható módon fejlődtek a szimuláció során.

Az elektronspin állapota egyértelműen a $|-1\rangle$ és a $|0\rangle$ állapotok között oszcillál, habár a görbe alakja nem egy egyszerű koszinusz függvényt mutat, hanem annál jóval bonyolultabb. Megfigyelhetünk lassú lebegéseket, illetve a Rabi-frekvenciával összemérhető frekvenciájú perturbációkat is. Ezek a jelenségek a magspinek hatásaként értelmezhetők és a rendszer komplexitásával magyarázhatók.

Fontos megemlíteni, hogy a rezonáns gerjesztés ellenére a Rabi-oszcilláció amplitúdója nem éri el a maximális 1.0-t. Ez a kiválasztási szabályok teljesülése miatt van így, miszerint $\Delta m = \pm 1$. Az $m_S = 0$ állapot huszonhétszeresen degenerált, ugyanis erre az állapotra a hiperfinom felhasadás nulla, a többi kölcsönhatás pedig nem számottevő. Mint korábban láttuk a $m_S = -1$ állapot huszonhét alállapota hét ágra szakad a hiperfinom kölcsönhatás miatt. A gerjesztés azonban csak a középső, hétszeresen degenerált állapottal rezonáns. A kiválasztási szabályokat, illetve a rezonáns gerjesztést szem előtt tartva észrevehetjük, hogy mindösszesen hét átmenet valósul meg a huszonhétből, így magspinnek termikus betöltése esetén az amplitú-



5.2. ábra. Rezonáns gerjesztés hatására az elektronspin állapotainak az időfejlődése. Az ábrákon jól kivehető a Rabi-oszcilláció, hogy a $|-1\rangle$ és a $|0\rangle$ állapotok közötti átmenet hogyan változik az időben, és hogy a $|+\rangle$ vektor is miként fluktuál, láthatóan sokkal nagyobb frekvenciával, mint a Rabi-frekvencia. A három ábra három különböző hosszúságú intervallumon vett időfejlődést mutat.

dó maximális értéke $7/27 = 0.259$ lehet, amely becslés jól egyezik a szimulációban tapasztaltakkal.

Érdemes a $|+\rangle$ állapot vetületét is külön megemlíteni, amely definíció szerint:

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |-1\rangle}{\sqrt{2}} \quad \hat{S}_x|+\rangle = \frac{1}{2}|+\rangle \quad (5.1)$$

Az 5.2. ábrán ezt a vetületet is feltüntettem. Jól látszik, hogy a $|+\rangle$ állapot oszcillációjának a frekvenciája sokkal nagyobb mint a Rabi-frekvencia. Továbbá, a $|+\rangle$ állapot oszcillációjának van egy jól észrevehető burkolója, amely a Rabi frekvenciával oszcillál. A $|-1\rangle$ és a $|0\rangle$ állapotok oszcillációjának a maximum helyeit összevetve a $|+\rangle$ állapot burkolójának a maximumhelyeivel egy 90 fokos fázistolást vettünk észre.

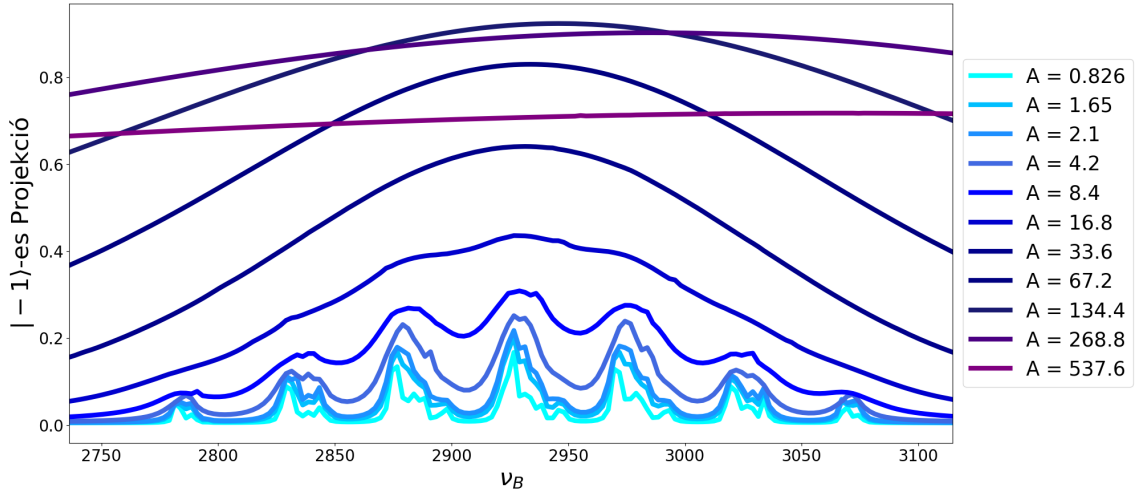
Az RWA közelítésből levezetett spirális mozgása a Bloch-vektornak jól magyarázza a láttotokat. A Bloch-gömbön való forgása az állapotnak jól szemlélteti, hogy mi is történik a $|+\rangle$ állapottal. A $|\psi(t)\rangle$ spirális úton megy át a $|0\rangle$ -ból a $|-1\rangle$ -be, és mivel eközben a Z tengely körül folyamatosan forog, ezért az X tengelyre vett vetülete szinuszosan oszcillál. A $|+\rangle$ állapotra vett vetület maximális, amikor az állapot a $|-1\rangle$ és a $|0\rangle$ állapotok 50%-os keveréke. Az 5.2 ábrán tapasztalt időfejlődés összhangban van a 2.2 ábrán ábrázolt spirális mozgással.

A továbbiakban fentebb mutatott oszcilláló függvények időátlagát tekintetük, amely tehát a Rábi oszcilláció amplitúdóját jellemzi.

5.2. A rezonanciagörbe finomszerkezete

A hiperfinom felhasadást a hidrogénatom spektrumában a központi proton okozza, hasonló a helyzet a dolgozatban tárgyalt esetben is. A három ^{14}N által felhasított energiaszintek hét ágat alkotnak, amint azt korábban részleteztem. A szintekhez tartozó állapotok az 1. táblázatban, illetve a 4.2. és a 4.2. ábrákon láthatóak.

A 5.3 ábrán a spin állapot $|-1\rangle$ állapotra vett vetületének időátlagát ábrázoltam különböző gerjesztési amplitúdók mellett. Alacsony gerjesztési amplitúdók esetén a hét energiaszint jól kivehető. Továbbá alacsony amplitúdók esetén a rezonancia csúcsok nagysága egy mintázatot követ, amely a szintek degeneráltsági fokával



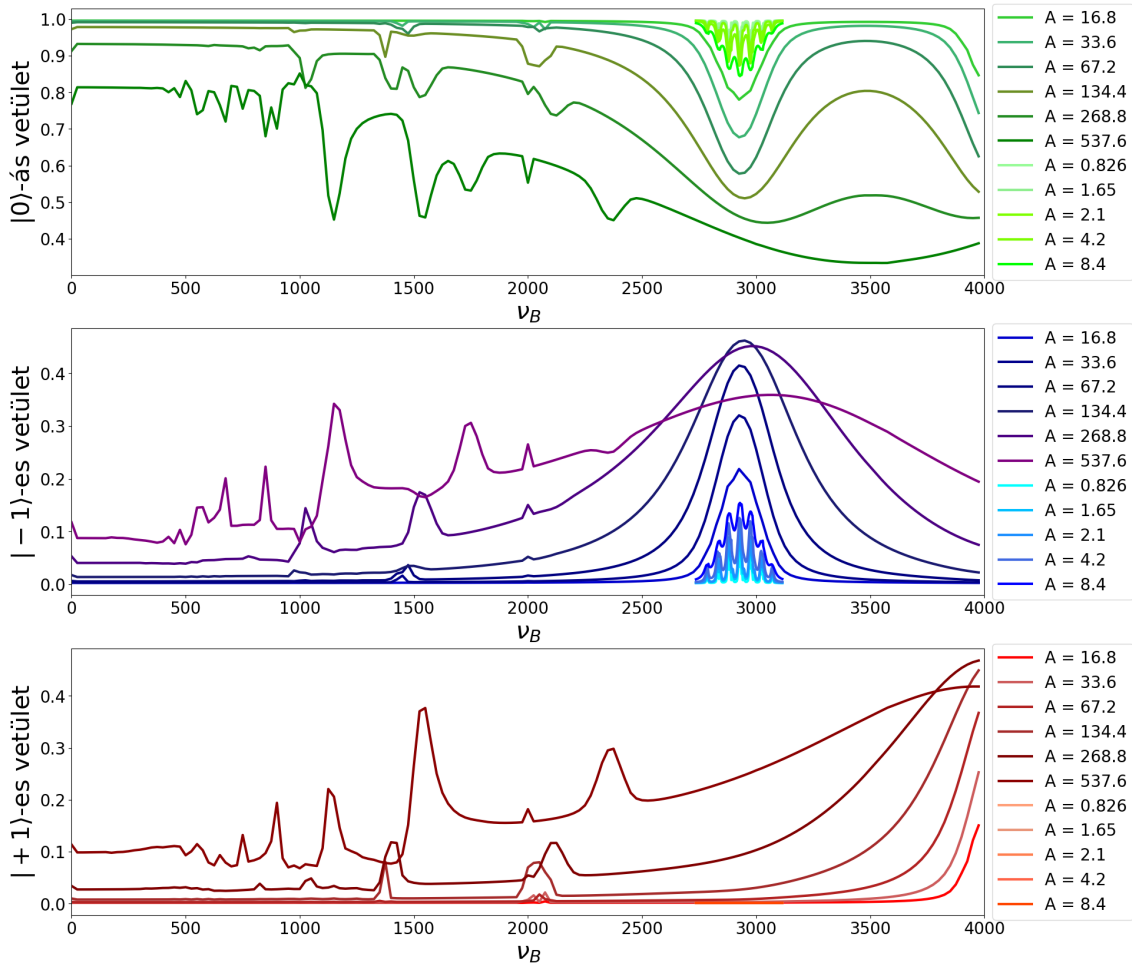
5.3. ábra. A $| - 1 \rangle$ állapotra vett vetülete a $|\psi(t)\rangle$ -nek.

magyarázható. Amint azt a 4.3 ábrán illusztráltam, a szintek degeneráltsági foka rendre 1, 3, 6, 7, 6, 3, 1. Jól látszik, hogy a rezonancia csúcsok nagysága is ezt a mintázatot követi.

5.3. A rezonancia görbék mikrohullámú gerjesztés okozta kiszélesedése

A kutatás során a megfigyelt rendszerre mikrohullámú gerjesztést kapcsoltam. Mivel valós kísérleti berendezések használata nélkül történtek a szimulációk, ezért olyan amplitúdójú elektromágneses hullámokkal való gerjesztésekkel is képesek voltunk megfigyelni a rendszer viselkedését, amelyek tényleges körülmények között technikai okok miatt nem valósulhattak volna meg.

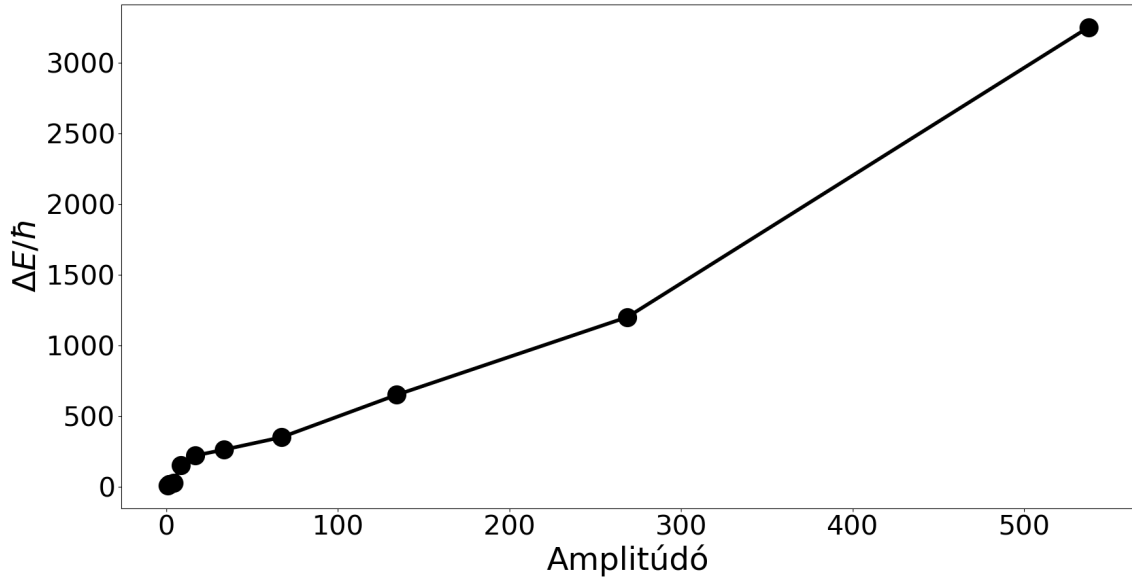
A szimulációkat egyre növekvő amplitúdójú mágneses gerjesztéssel futattam le, és ennek figyeltük befolyásoló tényezőjét a rezonanciagörbére. A 5.4. ábrán láthatóak a görbék a különböző amplitúdókra. A várakozásunk az volt, hogy a gerjesztés hatással van arra, hogy milyen módon történik a rezonancia. Amint azt korábban bemutatam, kisebb amplitúdójú gerjesztésekre a rendszer finomszerkezete is kirajzolódik, mind a hét felhasadt állapoton megjelent egy csúcs. A csúcsok magasabbak, minél nagyobb a degenerációja az adott állapotnak, hiszen annál nagyobb



5.4. ábra. A mikrohullámú gerjesztést a rendszerre kapcsolva megfigyelhetjük a rezonanciákat. Látható, hogy a kisebb gerjesztő amplitúdókra megjelent a hiperfinom felhasadás, azonban magasabb amplitúdóknál elmosódtak a csúcsok.

valószínűséggel gerjeszthető arra az energiaszintre. A $|0\rangle$ és a $|-1\rangle$ állapotok közötti oszcillációt igyekeztük előidézni, tehát arra számítunk, hogy a $|+1\rangle$ állapotra vett vetülete a $|\psi(t)\rangle$ állapotvektornak közel nulla lesz végig a folyamatok során. Itt egy széles frekvencia tartományon néztük meg a rendszer viselkedését, hogy meg tudjuk határozni, hogy a ν_B milyen intervallumban tudja megvalósítani a Rabi oszcillációt a $|0\rangle$ és a $|-1\rangle$ állapot között.

Érdeemes felfigyelni, hogy az egyre nagyobb amplitúdókra a gerjesztési tartomány is kiszélesedett. Ezt a jelenséget nevezzük mikrohullámú kiszélesedésnek, amelyet másképp az energia-idő Heisenberg féle bizonytalansági relációval is magyarázhatjuk. A kiszélesedés mértékét a 5.5 ábrán vizsgáltam meg a gerjesztési amplitúdó



5.5. ábra. Mikrohullámú kiszélesedés mértéket MHz egységben a gerjesztési amplitúdó függvényében, melynek egysége Gauss.

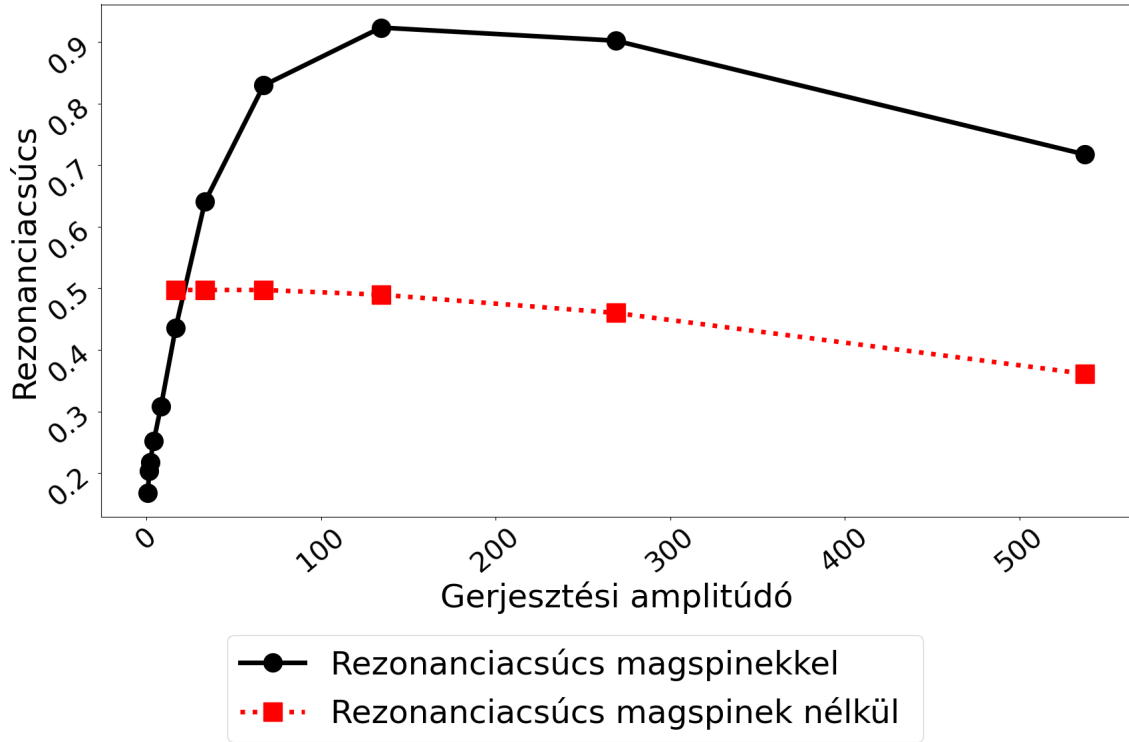
függvényében. Azt tapasztaltam, hogy a kiszélesedés közel lineárisan változik az amplitúdóval, habár a rezonancia csúcsok átfedése nagyban befolyásolja ezt a jelenséget.

5.4. A Rabi-oszcilláció amplitúdójának növekedése

A szimulációkat lefuttatva észrevettem, hogy a rezonanciacsúcsokhoz tartozó amplitúdó az elektromágneses gerjesztés amplitúdójának az emelkedésére megnőtt.

A 5.6 ábrán feketével ábrázoltam a központi rezonancia csúcs amplitúdójának az alakulását a gerjesztési amplitúdó növelésével. Jól látható, hogy a kezdeti érték, folyamatosan növekszik a gerjesztés erősödésével, majd elkezd csökkenni. A kezdeti növekedés oka az, hogy a hét energiaszinthez tartozó rezonancia csúcsok elkezdenek átfedni és összeadódni, amint a gerjesztési amplitúdót növeljük.

Megemlíteném továbbá az is, hogy a nagyobb gerjesztésekre a rezonanciacsúcsok csökkenni kezdenek (5.6. ábra), ezért összevetettem a $|-1\rangle$ állapotra vett projekciót a $|0\rangle$ -ás vetülettel. A $|0\rangle$ állapot vetülete a megfigyelt frekvenciatartomány végén újabb rezonánssá kezd válni, és újabb csúcsok jelennének meg, melyek a $|0\rangle \rightarrow |+1\rangle$ átmenethez tartoznak (Vegyük észre, hogy a 5.4. ábrán a $|0\rangle$ és a $|+1\rangle$ vetületekben

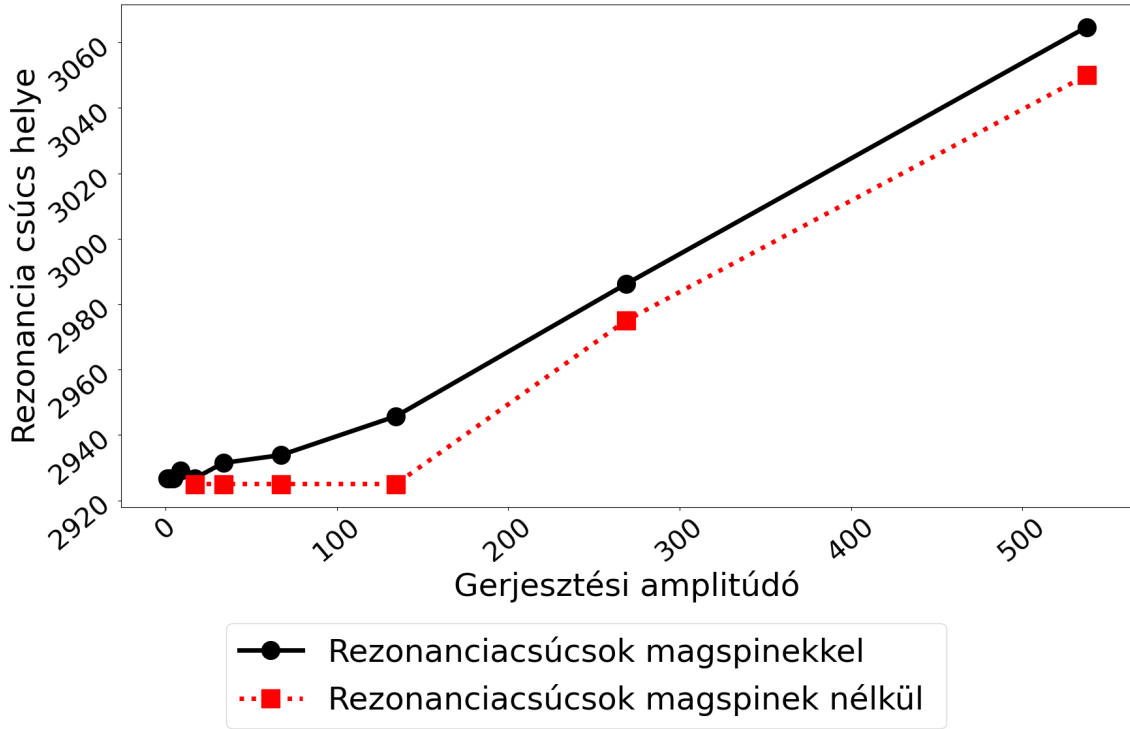


5.6. ábra. A rezonancia csúcsok amplitúdói a gerjesztési amplitúdó (Gauss) függvényében.

megjelent rezonanciacsúcsok teljesen összhangban vannak egymással). A jelenség esetleges magyarázata leginkább a $B_A = 537.6$ G értékű gerjesztés esetén érhető tetten. Ekkora tér esetében már a két nagyobb rezonanciacsúcs is összetolódik. Ennek magyarázata, hogy ilyen magas amplitúdójú gerjesztés esetén már a $|0\rangle \rightarrow |-1\rangle$ és a $|0\rangle \rightarrow |+1\rangle$ átmenetek közötti különbségek egybemosódnak. Tehát, a $m_S = 0$ állapotból már nem csak a $m_S = -1$ állapotba tudunk átmenetet képezni, így $m_S = -1$ állapotra csökkenő valószínűséggel gerjesztődik a rendszer, amint az amplitúdó tovább növekszik.

5.5. Rezonanciagörbe maximumának eltolódása

A kutatás során azt is megvizsgáltam, hogy a rezonanciagörbék maximumai milyen módon reagálnak a mikrohullámú gerjesztés amplitúdójára. Alapvetően azt várhatuk, hogy nem befolyásolja a rezonáns frekvencia értékét az amplitúdó, hiszen az amplitúdó és a frekvencia két különböző mértékben befolyásolja a tér energiáját,



5.7. ábra. A rezonancia csúcsok helye (MHz egységben) is eltolódnak a gerjesztési amplitúdó nagyságát növelve. Minél nagyobb az amplitúdó, annál nagyobb frekvencián lesz rezonáns a gerjesztés frekvenciája

azonban ezzel ellenkező eredményt kaptunk. Ez az eredmény már nincs összhangban a RWA közelítéssel, és a pontosabb elméleti leírás eredménye.

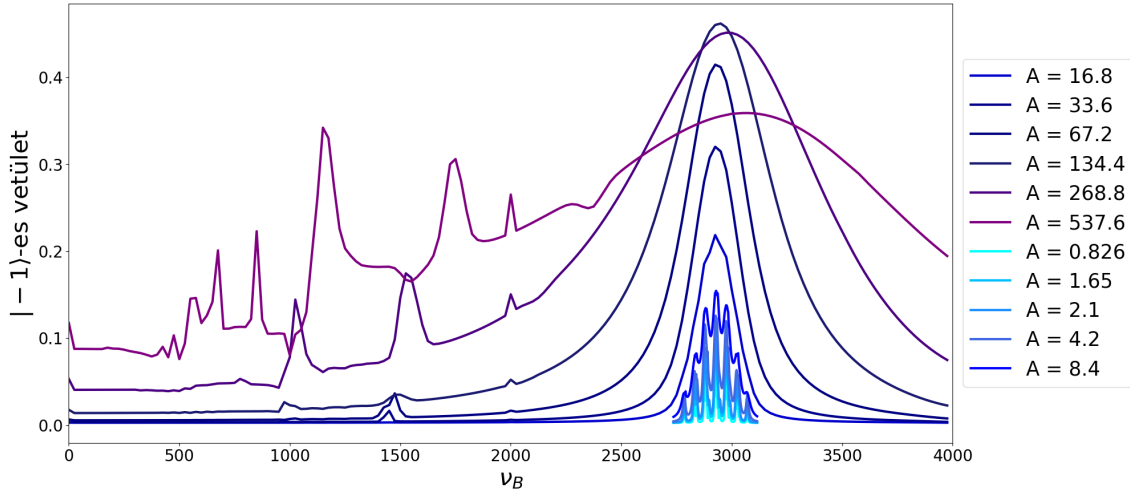
A rezonáns gerjesztésekhez tartozó csúcsok nagyobb gerjesztési amplitúdóra magasabb frekvencián jelentek meg. Érdekes észrevenni, hogy ez a jelenség nem kizárólag a magspineket figyelembe vevő szimulációk esetében volt így, hanem akkor is, amikor csak egy elektront figyeltem meg. Bár lényeges különbség az, hogy csak az általam vizsgált két legnagyobb amplitúdóra jelentkezett a legnagyobb eltérés, a kisebbekre a rezonanciacsúcs helye változatlan maradt.

A jelenség magyarázatául több effektus említhető meg, az egyik a $| - 1 \rangle$ és a $| + 1 \rangle$ ágak összeolvadása nagy amplitúdók esetén, lásd 5.4 ábra legfelső panel, továbbá a magspinekkel való kölcsönhatás, illetve az úgynevezett felöltöztetés (angolul *dressing*) jelensége, ahol a gerjesztő tér és rendszer már nem válassztatható szét. Ez utóbbi a félklasszikus leírás miatt megkérdőjelezhető. A szimulációkban a jelenség hatását nem tudtam megkülönböztetni, várhatóan az első két effektus játszott

szerepet a numerikus eredmények kialakításában.

5.6. Multifotonos elnyelések

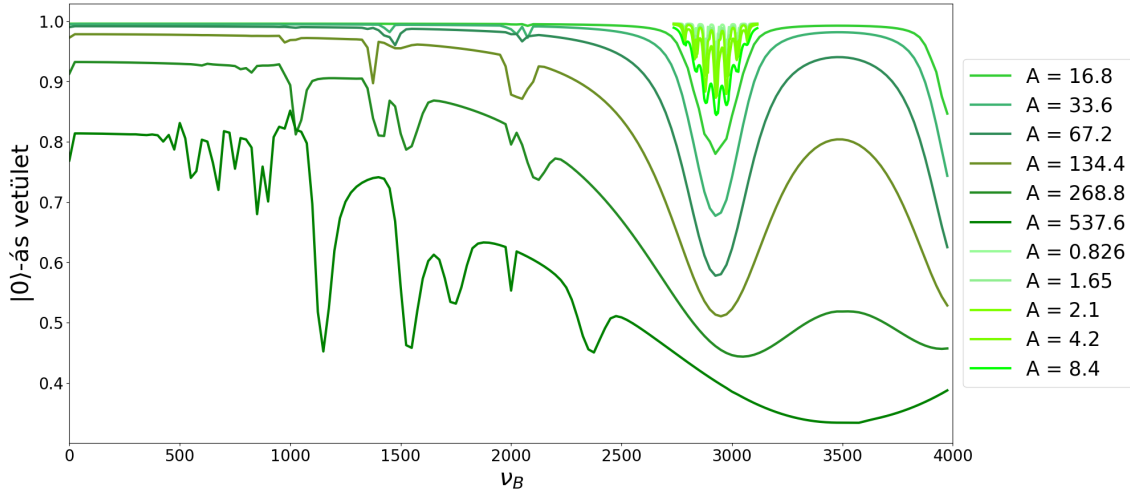
Dielektrikumokban és félvezetőkben a gerjesztés úgy történik, hogy az energiakülönbségnek megfelelő energiájú fotont nyel el az elektron, amely így le tudja küzdeni az energia gap-et. Azonban nagy intenzitású gerjesztésnél - tehát amikor nagy a foton-sűrűség -, akkor megtörténhet az, hogy két, a szükséges energia felével rendelkező foton abszorválódik egyszerre, ezzel biztosítva a megfelelő energiát. Természetesen ez megtörténhet három harmadakkora energiájú fotonnal is. Ugyanez négy, öt stb. darab foton abszorpcióra általánosítható. A 5.8 ábrán jól láthatók a többfotonos



5.8. ábra. A multifotonos elnyelésekhez tartozó csúcsok remekül megjelennek a fő rezonanciacsúcs felénél, harmadánál illetve nagyobb gerjesztési amplitúdók esetében negyedénél és ötödénél is.

elnyelések rezonanciái. Egész pontosan a $|0\rangle \rightarrow |-1\rangle$ átmenethez tartozó 2, 3, 4, 5, 6, 7 fotonos rezonancia csúcs is észrevehető a legnagyobb gerjesztési amplitúdó esetén. Azt is megfigyeltem, hogy a többfotonos csúcsok az amplitúdó növelésével nemlineáris ütemben jelennek meg.

Ez az eredmény szintén meglepő, ismervé hogy egy félklasszikus modellel dolgoztam, ahol a mágneses tér nincs kvantálva, tehát a fotonoknak expliciten nincsenek energiajáruléka a Hamiltoniban. Viszont ismert, hogy a félklasszikus leírás a kvantum leírás hátrameneteként magkapható erős terekre, mely jelen esetben fennáll.



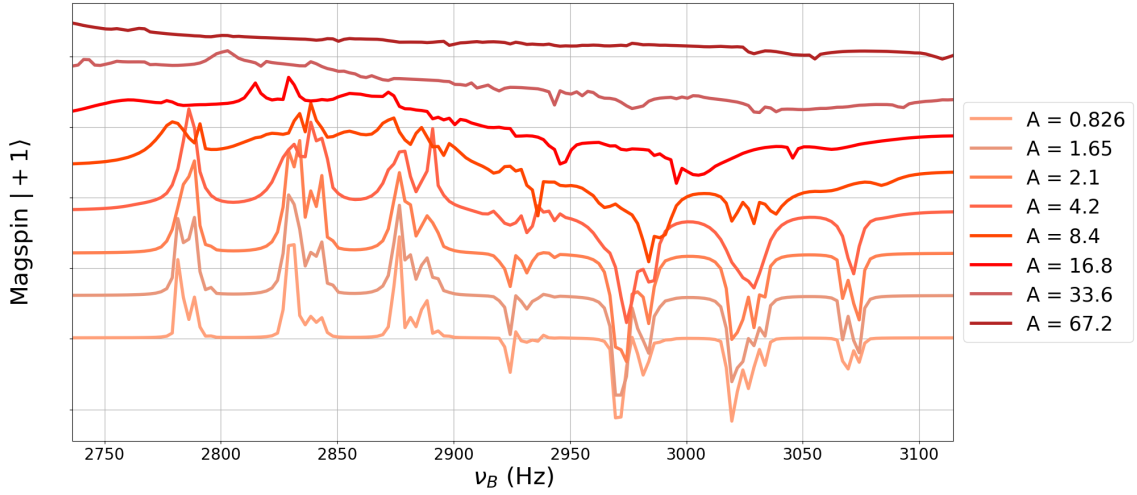
5.9. ábra

A 5.9 ábrán a $|0\rangle$ állapotra vett vetület időátlagát ábrázoltam. Itt megfigyelhetők a $|0\rangle \rightarrow |-1\rangle$ átmenet többfotonos elnyelődései mellett a $|0\rangle \rightarrow |+1\rangle$ átmenethez tartozó többfotonos elnyelődések rezonanciái is.

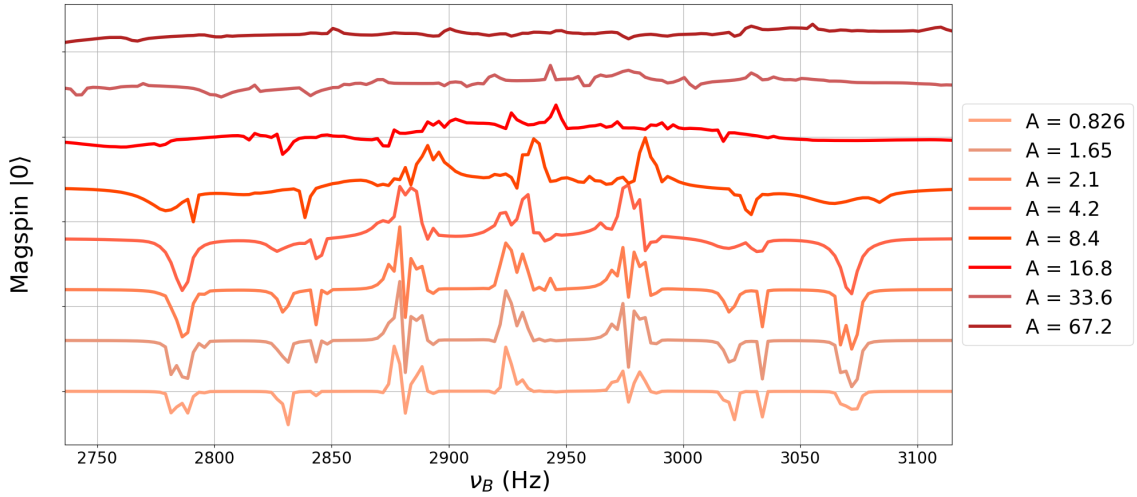
5.7. Magspinek dinamikája

A bór-vakancia centrumot három magspin veszi körül, melyek szintén kölcsönhatnak, mind az elektronnal, mind pedig az mágneses térrel. Azonban a három magspin időfejlődése nem különbözik egymástól, mivel a rendszer invariáns a 120° -os forgatásra és hiperfinom tenzor főértékei megegyeznek.

A kutatómunkám fontos észrevétele, hogy a magspinek is oszcillálnak a gerjesztő mikrohullámú tér hatására. Ez a jelenség figyelhető meg 5.11, 5.12, és 5.10 ábrákon. Látható, hogy a magspin átmenetek nagyban függnak attól, hogy a gerjesztési frekvencia melyik állapottal rezonáns. Továbbá az is észrevehető, hogy a rezonancia csúcsok jelentős mértékben eltolódnak a gerjesztési amplitúdó növelésével. A jelenség részletes vizsgálat további kutatómunkát igényel, amelyet a TDK folytatásaként tervezem elvégezni.



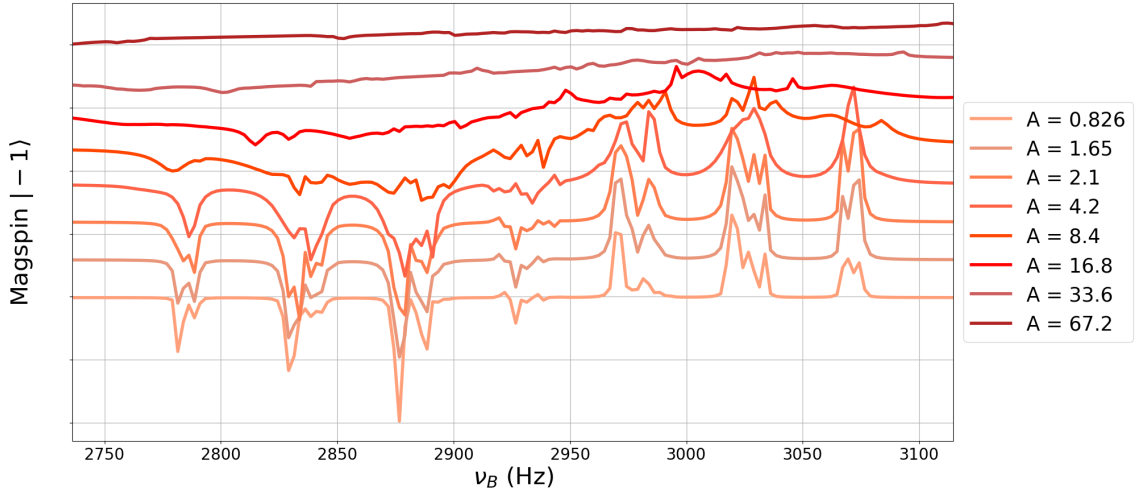
5.10. ábra. A magspinek $|+1\rangle$ állapotára vett vetületek alakulása a gerjesztési frekvenciától függően. Alacsony gerjesztési amplitúdóra sokkal nagyobb változást kapunk, mint a magasabb értékűekre. Fontos megfigyelni azt is, hogy a csúcsok elcsúsztak a frekvencia függvényében egyre feljebb haladva az amplitúdóval. Az igazán nagy B gerjesztésekre a kisebbeknél megjelent csúcsok egybemosódtak, majd a legnagyobbakra már teljesen eltűnt az állapot változása.



5.11. ábra. A magspinek $|0\rangle$ állapotának a csúcsai, hasonlóan a $|+1\rangle$ -hez magas gerjesztésre elmosódtak.

5.8. Magspinek szerepe a megfigyelt jelenségek kialakításában

A magspinek hatásának megvizsgálása érdekében olyan szimulációkat is futtattam, ahol csak az elektron spint vettem figyelembe a magspineket nem. Az ilyen módon

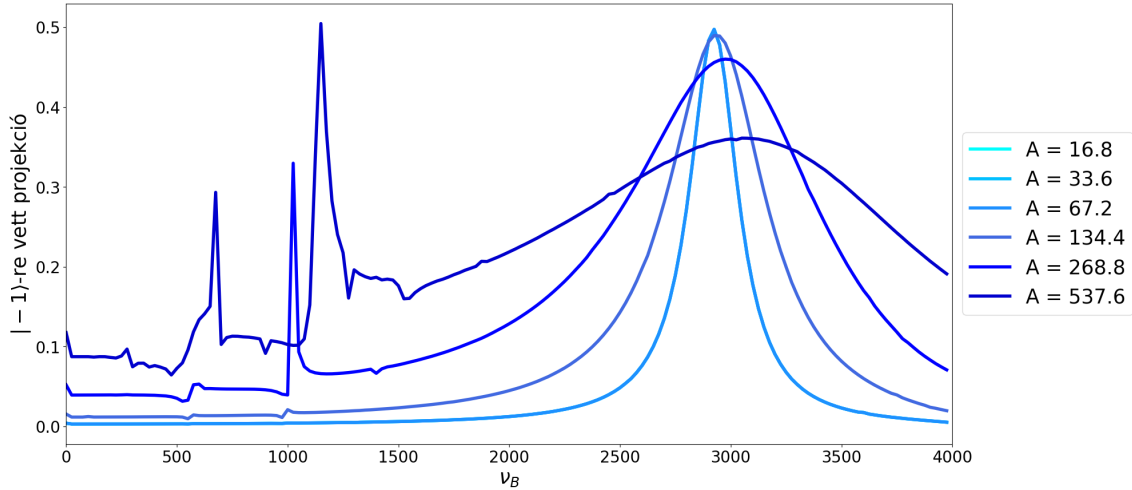


5.12. ábra. A magspinek $| - 1 \rangle$ -es állapotának alakulása a gerjesztési mágneses tér frekvenciájának függvényében.

kapott görbét a 5.13. ábra mutatja.

Alapvetően ha megnézzük legtöbb fentebb diszkutált jelenséget, nagyban befolyásolta a magspinek jelenléte az elektron energiaszintjeit. A magspinek szerepet játszanak az összes effektus kialakulásában, a figyelembe vételük nélkül a legtöbb jelenség megváltozott.

Ha csak az elektront figyeljük meg, és a magspinekkel való kölcsönhatást nem vesszük figyelembe, akkor észrevehetjük, hogy a multifotonos elnyelésekből kizárólag páratlan számú foton képes abszorbalni az elektron. Ennek oka, hogy a két, illetve további páros számú foton elnyelés egy tiltott energiaátmenet, amikor az oszcilláló tér merőleges a statikus mágneses tér irányára. Azonban a nitrogén atommagok olyan járulékot adnak a vakancia centrum energiaszintjeihez, hogy a páratlan számú foton elnyeléseken túl a páros számúak is megjelennek, ahogy a 5.8. ábrán is látszik. Továbbá észrevehető, hogy a csúcsok sokkal keskenyebbek és magasabbak a multifotonos elnyelések esetében, mint az egyszeres fotonnál.



5.13. ábra. A magspinek hatását figyelmen kívül hagyva szintén láthatunk rezonancia csúcsokat. A multifotonos elnyelések szintén észrevehetőek, viszont a kétszeres, illetve további páros számú fotonabszorpciós csúcsok nem jelentek meg, mivel ezek az átmenetek tiltottak.

6. Összegzés és kitekintés

6.1. Összegzés

A tudományos diákköri kutatómunkám keretein belül a bór-nitridben természetesen előforduló, illetve mesterségesen létrehozható bór-vakancia centrum spin állapotainak mikrohullámú gerjesztés hatására megfigyelhető koherens viselkedését tanulmányoztam. A gerjesztési amplitúdó változtatásával a jelenségek egy széles spektrumát figyeltem meg, amelyeket részletesen ismertettem a dolgozatomban. Néhány esetben releváns kísérleti méréseket is találtunk, amelyek megerősítik a numerikus szimulációk eredményeit.

A TDK munkám egyik - talán legfontosabb - következtetése, hogy a VB centrum nem kezelhető úgy, mint egy egyedi elszigetelt elektronspin, mivel a közeli nitrogén magspinekkel erősen összezsugorodik és ezek is aktívan részt vesznek a mikrohullámú gerjesztés hatására megfigyelhető jelenségek kialakításában. Ennek jelentőségét az adja, hogy tipikusan mikrohullámú pulzusokat használnak a VB centrum spin szabadsági fokainak a koherens manipulálására. Eredményeim alapján az várható, hogy ezek a pulzusok nemcsak az elektronspin állapotokat hanem a magspin állapo-

tokat is befolyásolják. Mivel a magspinek gyengébben csatolódnak a környezetükhöz mint az elektron spinek, ezért koherencia idejük jelentősen hosszabb lehet az elektronspin koherencia idejénél. Véleményünk szerint a VB centrum vizsgálata során egyes kísérletekben tapasztalt anomálishan hosszú koherenciaidő a magspinek hatása miatt lép fel. Ezen jelenség megismertetésével illetve hasznosításával, olyan új mérés technikai megoldások valósíthatók meg, amelyek a megnövekedett koherencia idő segítségével nagyobb érzékenységet jelenthetnek a VB centrumon alapuló atomi szenzorok esetén.

6.2. Kitekintés

A TDK során ezidáig elvégzett munkám inkább tekinthető egy feltáró kutatásnak, mint egy jól definiált probléma megoldásának. Számos olyan jelenséget figyeltem meg a numerikus szimulációkban, amelyek részletes megértése még további kutatómunkát igényel. Ezek közül két témakört említenék meg:

- több fotonos elnyelődés, illetve
- a VB centrum koherencia idejének a meghatározása,

ahol a kutatásaimat akár kísérleti együttműködések keretein belül is tudom folytatni. Mindkét terület a tudományos közösség számára jelentős eredményekhez vezethet és a területen folytatott fejlesztőmunka előmozdítását érheti el. Ezért is elsődleges célunk a meglévő, és a TDK munkám folytatásaként megszülető eredmények publikálása szakfolyóirat cikkekben.

7. Köszönetnyilvánítás

Ezúton is szeretnék köszönetet mondani elsősorban témavezetőmnek, Dr. Ivády Viktornak a sok hasznos tanácsért, útmutatásért és segítségért. Ezen felül hálával tartozom a Kvantuminforantikai Nemzeti Laboratóriumnak (2022-2.1.1-NL-00004), hogy lehetővé tették a kutatást. Illetve köszönöm szüleimnek, családomnak és barátaimnak a támogatást.

Hivatkozások

- [1] Marcus W. Doherty és tsai. “The nitrogen-vacancy colour centre in diamond”. *Physics Reports*. The nitrogen-vacancy colour centre in diamond 528.1 (2013. júl. 1.), 1–45. old. ISSN: 0370-1573. (Elérés dátuma 2020. 03. 25.).
- [2] Kazuyuki Fujii. “Introduction to the Rotating Wave Approximation (RWA): Two Coherent Oscillations”. *Journal of Modern Physics* 08.12 (2017), 2042–2058. old. DOI: 10.4236/jmp.2017.812124. URL: <https://doi.org/10.4236/jmp.2017.812124>.
- [3] A. K. Geim és I. V. Grigorieva. “Van der Waals heterostructures”. *Nature* 499.7459 (2013. júl.). Number: 7459 Publisher: Nature Publishing Group, 419–425. old. ISSN: 1476-4687. (Elérés dátuma 2021. 05. 10.).
- [4] Andreas Gottscholl és tsai. “Initialization and read-out of intrinsic spin defects in a van der Waals crystal at room temperature”. *Nature Materials* 19.5 (2020. máj.). Number: 5 Publisher: Nature Publishing Group, 540–545. old. ISSN: 1476-4660. (Elérés dátuma 2021. 05. 03.).
- [5] Andreas Gottscholl és tsai. “Spin defects in hBN as promising temperature, pressure and magnetic field quantum sensors”. *Nature Communications* 12.1 (2021. júl. 22.). Bandiera_abtest: a Cc_license_type: cc_by Cg_type: Nature Research Journals Number: 1 Primary_atype: Research Publisher: Nature Publishing Group Subject_term: Electronic properties and materials;Qubits Subject_term_id: electronic-properties-and-materials;qubits, 4480. old. ISSN: 2041-1723. (Elérés dátuma 2021. 07. 27.).
- [6] A. Haykal és tsai. “Decoherence of V_{B} spin defects in monoisotopic hexagonal boron nitride”. *Nature Communications* 13.1 (2022. júl. 27.). Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group, 4347. old. ISSN: 2041-1723. (Elérés dátuma 2022. 09. 29.).
- [7] A. J. Healey és tsai. “Quantum microscopy with van der Waals heterostructures”. *arXiv:2112.03488 [cond-mat]* (2021. dec. 6.). arXiv: 2112.03488. (Elérés dátuma 2022. 01. 03.).

- [8] Viktor Ivády és tsai. “Ab initio theory of the negatively charged boron vacancy qubit in hexagonal boron nitride”. *npj Computational Materials* 6.1 (2020. ápr. 24.). Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group, 1–6. old. ISSN: 2057-3960. (Elérés dátuma 2021. 02. 26.).
- [9] Martin Kliesch és Arnau Riera. “Properties of thermal quantum states: locality of temperature, decay of correlations, and more”. (2018). DOI: 10.48550/ARXIV.1803.09754. URL: <https://arxiv.org/abs/1803.09754>.
- [10] Daniel A. Lidar. *Lecture Notes on the Theory of Open Quantum Systems*. 2019. DOI: 10.48550/ARXIV.1902.00967. URL: <https://arxiv.org/abs/1902.00967>.
- [11] Romana Schirhagl és tsai. “Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond: Nanoscale Sensors for Physics and Biology”. *Annual Review of Physical Chemistry* 65.1 (2014). _eprint: <https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-040513-103659>, 83–105. old. (Elérés dátuma 2021. 01. 14.).
- [12] J.-P. Tetienne. “Quantum sensors go flat”. *Nature Physics* (2021. aug. 9.). Bandiera_abtest: a Cg_type: Nature Research Journals Primary_atype: News & Views Publisher: Nature Publishing Group Subject_term: Qubits;Two-dimensional materials Subject_term_id: qubits;two-dimensional-materials, 1–2. old. ISSN: 1745-2481. (Elérés dátuma 2021. 08. 14.).
- [13] Toan Trong Tran és tsai. “Quantum emission from hexagonal boron nitride monolayers”. *Nature Nanotechnology* 11.1 (2015. okt.), 37–41. old. DOI: 10.1038/nnano.2015.242.