

#### 4. félévi beszámoló

**Udvarhelyi Péter** ([udvarhelyi.peter@wigner.mta.hu](mailto:udvarhelyi.peter@wigner.mta.hu))

Statisztikus Fizika, Biológiai Fizika és Kvantumrendszerek Fizikája PhD program

Témavezető: Gali Ádám, Kürti Jenő

A dolgozat címe: Ab initio study of solid state quantum bits for quantum application and sensing

##### *Bevezetés:*

A kvantumtechnológia iránt világszerte magas a tudományos érdeklődés. A kvantumbitek fizikai megvalósításának egyik ígéretes megoldását a szilárdtest kvantumbitek jelentik. Ezek jól izoláltak környezetüktől, de a környezettel való kölcsönhatást kihasználhatjuk nagy érzékenységgű, nanoméretű szenzorok létrehozására. A félvezető anyagok paramágneses ponthibái kiváló jelöltek ennek megvalósítására. A ponthibák közül a legtöbbet tanulmányozott a gyémántbeli negatívan töltött nitrogén-vakancia centrum (NV). Újabban ennek alternatívájaként a szilícium-karbid divakancia és szilícium-vakancia kvantumbitjei kerültek előtérbe.

Doktori munkám során a fent említett ponthibák ab initio tanulmányozását végzem magas szintű sűrűségfüggvény elmélet (DFT) módszerrel. Célom a kritikus magneto-optikai paraméterek meghatározása a környezeti hatások függvényében. Az eredményekből a ponthibák nanoskálájú szenzor alkalmazási lehetőségeire lehet következtetni.

##### *Az előző három félévben elért kutatási eredmények összegzése:*

Az első félévben szilárdtestbeli paramágneses ponthibák spin-spin kölcsönhatásának vizsgáltam, valamint a gyakorlatban legelterjedtebb pont-pont rendű dipól közelítés pontosságának növelésére az elektronspin sűrűség térbeli eloszlását vizsgáltam. A kiterjedt spinsűrűségű gyémántbeli NV és szubsztitúciós nitrogén ponthibák precíz távolságmeghatározására a spinsűrűség tömegközéppontjának ab initio számítását végeztem. Az eredmények nm nagyságrendű eltérst mutatnak a hibákra centrált spinsűrűség közelítéstől, ezek figyelembe vétele elengedhetetlen az ilyen pontosság eléréséhez.

A második félévben a gyémántbeli  $N_2V$  centrum ab initio vizsgálatát végeztem kvantum memória alkalmazások szempontjából. Ehhez HSE06  $\Delta$ SCF számításokat végeztem a zérustér felhasadási paraméterek meghatározására, valamint az erősen korrelált gerjesztett állapotok számításában Hubbard-model hamiltonit használtam. A Hubbard paramétereket a kétszeresen negatívan töltött referencia állapot hullámfüggvényeiből határoztam meg. Az eredmények lehetővé tették az alacsony energiás optikai átmenetek feltérképezését. A rendszerközi átmenetek rendjének meghatározásával spin szelektív optikai ciklust azonosítottam. Ennek eredményeként a rendszerben megvalósítható optikailag detektált mágneses rezonancia (ODMR).

A harmadik félévben a gyémántbeli NV centrum spin-mechanikai deformáció csatolását vizsgáltam. A centrum  $C_{3v}$  pontcsoportjának megfelelően hat csatolási állandó meghatározását a megfelelően deformált szupercellák esetén a zérustér felhasadási paraméterek deformáció függéséből határoztam meg. A csatolási erősségek átszámítása spin-mechanikai feszültség csatolásra a gyémánt rugalmas állandói alapján történt. Az eredmények alapján mechanikailag

gerjesztett spin átmenetek hozhatók létre. Ennek számos előnye van a hagyományos mágneses térrel létrehozott spin rezonanciával szemben, például mágnesesen tiltott átmenetek is gerjeszthetők. Hasonló számításokat végeztem a köbös 3C szilícium karbid (SiC) divakancia centrumára.

*Az aktuális félévben elvégzett kutatási eredmények összefoglalása:*

A spin-mechanikai feszültség csatolásokról ismeretében a gyémántbeli NV és a 3C SiC divakancia hibák mechanikai feszültség érzékenységét hasonlítottam össze. A fotonzaj limitált érzékenység egy Hahn-echo kísérletben

$$\eta = \frac{1}{4gC\sqrt{\beta T_2}}$$

ahol  $g$  a csatolási erősség,  $C$  az ODMR kontraszt,  $\beta$  az átlagos fotonszám,  $T_2$  a koherencia idő. A becsléshez valós ODMR mérési paramétereket használtam, figyelembe véve a 3C minták tisztaságának további javulását a 4H-beli értékeket használtam. Az legfontosabb eredmények a  $g_{43}$  és  $g_{41}$  csatolási érzékenységek. Előbbinél a divakancia lényeges fölényt mutat az NV-vel szemben, valamint utóbbinál azonos értéket mutat. Az izotóp koncentráció szabályozásával elérhető magasabb koherencia idő magasabb érzékenységet eredményez, de a divakancia fölényén nem változtat. Az eredmények, valamint a SiC gyémánttal szembeni előnyei a megmunkálás és integrálhatóság szempontjából a divakanciát előnyösebbé teszi a nanoskálájú mechanikai feszültség érzékelésben. Mivel 3C SiC epitaxiális vékonyréteg növeszthető makroszkópikus szilícium hordozóra, ezért a divakancia szenzor integrálásával egy teljes szilícium nanoelektromechanikai rendszer (NEMS) létrehozása lenne lehetséges. A részletes eredmények megtekinthetők online (<https://arxiv.org/abs/1805.04706>).

További kutatásomban a 4H SiC negatíván töltött szilícium vakanciáját ( $V_{Si}$ ) vizsgálom. Célom az alap és a 4A2 gerjesztett állapot közötti polarizáció változás meghatározása, valamint a 4E gerjesztett állapot Jahn-teller instabilitásának számolása. Előbbi az optikai gerjesztés Stark-effektus miatti ZPL eltolódására adna magyarázatot, míg utóbbi a zérustér felhasadás hőmérsékletfüggésére. Ehhez először a hibamentes 4H SiC szupercellát kellett nagy pontossággal relaxálnom. A rácsállandó relaxáláshoz  $8 \times 8 \times 4$ -es k-pont felosztással és 1000 eV síkhullám levágással számoltam mind PBE és HSE funkcionállal. A szupercella megkonstruálása után elvégeztem a ponthiba relaxációját mindkét funkcionállal az alap és gerjesztett állapotokra is. A gamma pontos PBE eredményeket felhasználva Berry-fázis módszerrel meghatároztam a polarizáció különbséget mind a köbös (k) és hexagonális (h) hibahelyen:  $-0.02$  és  $0.04$  eÅ megfelelően. Az eredmények összhangban vannak a kísérleti megfigyeléssel, vagyis a ZPL eltolódás elhanyagolhatóan kicsi. A számításokat jelenleg több k-ponttal valamint HSE funkcionállal pontosítom.

*Publikációk:*

Ab initio theory of the  $N_2V$  defect in diamond for quantum memory implementation

Péter Udvarhelyi, Gergő Thiering, Elisa Londero, and Adam Gali

Phys. Rev. B 96, 155211 – Published 30 October 2017

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.155211>

Spin-strain interaction in nitrogen-vacancy centers in diamond

Péter Udvarhelyi, Vladyslav O. Shkolnikov, Adam Gali, Guido Burkard, András Pályi

arXiv <https://arxiv.org/abs/1712.02684>

elbírálás alatt Phys. Rev. B-ben

Ab initio spin-strain coupling parameters of divacancy qubits in silicon carbide

Péter Udvarhelyi, Adam Gali

arXiv <https://arxiv.org/abs/1805.04706>

elbírálás alatt Phys. Rev. Applied-ban

*Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben:*

Nemegyensúlyi statisztikus fizika EA (FIZ/3/033E)

Kísérleti módszerek a szilárdtest fizikában II. (FIZ/3/052E)

*Oktatási tevékenység:*

A félévben molekulamodellezés labort tartottam a Modern fizika laboratóriumi gyakorlatok tárgyból 8 alkalommal 4 órát. A Kísérleti módszerek a szilárdtest fizikában II. tárgyból magmágneses rezonancia előadást tartottam angol nyelven 2 alkalommal 90 percet.