

Kutatómunka beszámoló

Udvarhelyi Péter

2017-18/1

Témavezetők:

Gali Ádám, Kürti Jenő

Bevezetés:

Ebben a félévben a gyémántbeli negatívan töltött nitrogén vakancia (NV) centrum, valamint a 3C-SiC-beli divakancia centrum spin-mechanikai deformáció csatolási erősségeinek meghatározását végeztem kvantummechanikai számításokkal. Mivel a szilárdtest kvantum centrumok elektronspinjének kölcsönhatása a környezet különböző fizikai paramétereivel lehetővé teszi nanoskálájú metrológiai alkalmazások megvalósítását, ezért nagy jelentőségű a centrumok és a kristály-deformáció kölcsönhatásának ismerete. Továbbá ac mechanikai deformációval elméletileg koherens spin kontroll valósítható meg a centrum mágneses alállapotai közötti átmenettel, még az egyébként mágnesesen tiltottak között is. Ez lehetővé teszi a mikrohullámú spin-kontroll helyett a piezo-aktuátorok használatát a kvantum információs eljárásokban. A fenti alkalmazásokhoz a legígéretesebb eszköz a gyémántbeli NV centrum kiváló optikailag detektált mágneses rezonancia (ODMR) paraméterei (nagy kontraszt, fotonszám) és koherencia ideje miatt. További ígéretes centrum a 3C-SiC-beli divakancia, melynek igen nagyok a spin-mechanikai feszültség csatolási paraméterei, viszont jelenlegi ODMR paraméterei miatt kevésbé érzékeny a mechanikai feszültségre.

A félévben elvégzett kutatás:

A negatívan töltött NV centrum triplet alapállapotának spin-deformáció kölcsönhatási Hamiltonijának teljes alakját Pályi András vezette le elemi szimmetria megfontolások alapján. Én a Hamiltoni csoportelméleti levezetésében vettem részt, az általánosított Unsold-elméletből kiindulva csoport reprezentációs elmélettel igazoltam a kölcsönhatás C_{3v} -beli alakját:

$$H = [h_{41}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + h_{43}\varepsilon_{zz}]S_z^2 + \frac{1}{2} \left[h_{26}\varepsilon_{zx} - \frac{1}{2}h_{25}(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) \right] \{S_x, S_z\} \\ + \frac{1}{2} (h_{26}\varepsilon_{yz} + h_{25}\varepsilon_{xy}) \{S_y, S_z\} + \frac{1}{2} \left[h_{16}\varepsilon_{zx} - \frac{1}{2}h_{15}(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) \right] (S_y^2 - S_x^2) \\ + \frac{1}{2} (h_{16}\varepsilon_{yz} + h_{15}\varepsilon_{xy}) \{S_x, S_y\}$$

ahol h jelöli a spin-deformáció (ε) csatolási erősségeket. Hasonló alak kapható a spin-feszültség (σ) csatolási erősségekkel, amit g -vel jelölhetünk. Ezen csatolási-erősségek numerikus meghatározását végeztem sűrűségfüggvény elméletet (DFT) használó síkhullám bázisú programcsomaggal (VASP). Ehhez elektronszerkezeti számolást végeztem geometriai struktúra optimalással együtt PBE funkcionált használva. A konvergencia tesztek után a

megfelelő pontosságú csatolási paramétereket 600 eV-os síkhullám levágási energia mellett lehet megkapni. A törzselektronokat PAW formalizmusban kezeltem. A gyémántbeli NV modelljére 512-atomos köbös szupercellát használtam, a számításokat a Γ -pontban végeztem. A mechanikai deformáció modellezéséhez a köbös szupercella paralelepipedonná való deformációját használtam a lokális NV rendszerbeli deformációt áttranszformálva a köbös kristályrendszerbeli deformációvá. A deformált szupercellán belül az atomok szabadon relaxáltak. A csatolási erősségek meghatározáshoz a zero field splitting (ZFS) D-tenzorának kiszámítását használtam. Ehhez felhasználtam a spin tenzorszorzat (a ZFS Hamiltoniban) és a spin bilineáris formulák (a spin-deformáció Hamiltoniban) közti egyértelmű megfeleltetést, amiből következően a megfelelő $D(\varepsilon)$ komponensekből származtathatók a h csatolási erősségek. A D-tenzor számításához szintén a VASP implementációt használtam. A pontos meghatározáshoz -0.01 és 0.01 deformáció tenzor komponensek között 11 ekvidisztáns pontban végeztem el a számolást minden komponensre, $D(\varepsilon)$ meredekségének meghatározásához egyenes illesztést végeztem. Az így kapott spin-deformáció csatolások és a kísérleti stiffness-tenzor (C) ismeretében a spin-mechanikai feszültség csatolási erősségek kifejezhetők $\varepsilon = C^{-1}\sigma$ helyettesítéssel a Hamiltoniban (a megfelelő transzformációk elvégzése után Voight reprezentációban). Az eredmények az 1. ábrán láthatók.

parameter	value (MHz/strain)	parameter	value (MHz/GPa)
h_{43}	2300 ± 200	g_{43}	2.4 ± 0.2
h_{41}	-6420 ± 90	g_{41}	-5.17 ± 0.07
h_{25}	-2600 ± 80	g_{25}	-2.17 ± 0.07
h_{26}	-2830 ± 70	g_{26}	-2.58 ± 0.06
h_{15}	5700 ± 200	g_{15}	3.6 ± 0.1
h_{16}	19660 ± 90	g_{16}	18.98 ± 0.09

1. ábra: spin-deformáció és spin-feszültség csatolási erősségek DFT számítások eredményeként.

A kapott eredmények átváltva a Barson et al. kísérletekben használt hibrid-reprezentációban megadott csatolási erősségek formájára, a kísérletekkel megegyező előjelű és nagyságrendű csatolási erősségeket kaptam, ami megerősíti a DFT számítási módszert és annak predikcióját a kísérletekben még nem meghatározott csatolási paraméterekre.

A fenti számolásokat elvégeztem 3C-SiC divakanciára is, egy NV-hez hasonló tulajdonságokkal bíró centrumra. A számítások célja alternatíva nyújtása a metrológiában széles körben alkalmazott NV-hez. A szilícium-karbid mátrix ugyanis előnyösebb a gyémántnál (könnyebb előállítás és kezelhetőség) az alkalmazások megvalósítása szempontjából. Az kvantummechanikai számításaim az NV-nél kisebb spin-deformáció csatolási erősségeket adtak, ugyanakkor a SiC kisebb stiffness értékei a mechanikai feszültségben erősebb csatolást biztosítanak. Az alkalmazások területén azonban a csatolási állandó önmagában nem biztosítja a divakancia előnyét. Az érzékenységet számos nem a centrum által meghatározott tényező befolyásolja. Az érzékenység becslését a mágneses tér érzékelésekben használt formula alapján adhatjuk meg:

$$\eta = \frac{Z}{2\pi g e^{\left(\frac{-t}{T_2}\right)^n} \sqrt{t}}$$

ahol Z a sötét és világos alállapot kontrasztjától és a fotonszámtól függ, t a mérési idő, T_2 a homogén spin koherencia idő, g a spin csatolási erősség. A divakancia és NV ODMR paraméterei között a legnagyobb különbség a kontraszt értéke. Előbbi tipikusan 7.5 % amíg utóbbi 30 %. Emiatt a divakancia ODMR Hahn-echo jele kevésbé érzékeny a mechanikai feszültségre, mint az NV esetében mérhető. A becslésem szerint ugyanakkor nincs nagyságrendi különbség a két centrum érzékenységében, valamint a divakancia ODMR kontrasztjának jövőbeli növekedésével (13 % fölé) az érzékenység arányok megfordíthatók.

Publikációk:

megjelent:

Ab initio theory of the N2V 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

előkészületben:

Spin-strain interaction in nitrogen-vacancy centers in diamond

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

elbírálás alatt a Physical Review X-ben

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

Spin-strain interaction in 3C-SiC divacancy center

Péter Udvarhelyi and Adam Gali

kézirat előkészületben

Tanulmányi tevékenység:

Az ELTE-n felvett kurzusaim a félévben: Tömbi nanoszerkezetű anyagok, Mikro és nanotechnológia I., Szinkrotron sugárzás és alkalmazásai.

Oktatási tevékenység:

Atom és molekulafizika gyakorlatot tartottam a félévben.