

LATVIJAS UNIVERSITĀTE
FIZIKAS UN MATEMĀTIKAS FAKULTĀTE
FIZIKAS NODAĻA

**Krāsu centru spinu polarizācijas ar gaismu modelēšana
dimantu kristālos**

BAKALAURA DARBS

Autors: **Marija Isupova**

Studenta apliecības Nr.: mi13010

Darba vadītājs: Dr. habil. phys. Mārcis Auziņš

RĪGA, 2017

Anotācija

Pateicoties krāsu centru dimanta kristālos struktūrai, pastāv iespēja polarizēt to spinus ar gaismu, elektrisko vai magnētisko lauku, kas var būt noderīgs, piemēram, vājo lauku detektēšanā. Darbā tika izstrādāts matemātisks modelis krāsu centra spina mijiedarbībai ar lāzera starojumu ārējā magnētiskā un mikroviļņu lauka klātbūtnē, kas palīdzēs saprast dimanta kristālos notiekošo procesu dinamiku. Modelis tika realizēts *Wolfram Mathematica* programmas ietvaros un pārbaudīts, variējot to parametrus, kā arī simulācijas rezultāti bija salīdzināti ar reāliem optiski detektētās magnētiskās rezonanses spektriem.

Atslēgvārdi: krāsu centrs, NV centrs, spinu polarizācija, ODMR

Abstract

Color centers in diamonds have structure, which could be manipulated and polarized by light, electric or magnetic fields. This property could be useful, for example, in detection of weak fields. In this bachelor thesis author developed mathematic model to describe interaction between spin of color center and laser radiation in presence of magnetic and microwave fields, which could be helpful to understand dynamics of processes in diamond crystals. The model was developed in *Wolfram Mathematica* environment and tested by varying its parameters, as well as results of simulations were compared with the results of real optically detected magnetic resonance spectra.

Keywords: color center, NV center, spin polarization, ODMR

SATURS

Apzīmējumu saraksts.....	5
1. Ievads.....	6
1.1 Darba motivācija.....	6
1.2 Darba mērķis.....	6
1.3 Darba uzdevumi.....	6
1.4 Autora ieguldījums	6
1.5 Darba struktūra	6
2. Literatūras apskats	7
2.1 NV centrs dimantā.....	7
2.2 NV centru optiskās (enerģētiskās) īpašības.....	10
2.3 NV centru spinu polarizācija ar gaismu	11
2.4 Optiski detektēta magnētiskā rezonanse (ODMR).....	11
3. Modelēšana	14
3.1 Enerģētisko līmeņu apdzīvotības modelēšana lāzera starojumā	14
3.2 Modeļa testēšana pie dažādām parametru vērtībām.....	19
3.3 Spina polarizācija	20
3.4 NV centrs ārējā magnētiskajā un mikroviļņu frekvences laukos	21
3.5 Modeļa testēšana	23
3.6 Iekšējā sprieguma ievērošana modelī.....	28
4. Secinājumi	31
5. Pateicības	32
6. Izmantotā literatūra un avoti.....	33
7. Pielikumi.....	36
Dokumentārā lapa.....	42

APZĪMĒJUMU SARAKSTS

NV centrs – slāpekļa-vakances centrs

ZPL – bezfononulīnija

CB – vadāmības zona

VB – valences zona

ODMR – optiski detektēta magnētiskā rezonanse

MW – mikroviļņi

1. IEVADS

1.1 Darba motivācija

Ir zināmi vairāki defektu veidi dimanta kristāliskajā struktūrā. No tiem lielu uzmanību piesaista NV krāsu centri, kuri rodas, izņemot vienu oglekļa atomu no dimanta kristāliskā režģa un sasaistot to ar vienu slāpekļa atomu, kurš aizstāj oglekļa atomu. Kaut arī NV centri ir pazīstami jau ap 50 gadiem, to struktūra un īpašības joprojām ir aktīvi pētāmi [1].

Viens no NV centru potenciālajiem pielietojumiem ir nanomēroga magnetometrija, kura ļauj detektēt ļoti vājus laukus un dažos gadījumos var kalpot par alternatīvu tradicionālajai optiskajai mikroskopijai [2]. Līdzīgi tie ir daudzsološi vājo elektrisko lauku detektēšanā [3], kā arī tika piedāvāts izmantot tos kā augsti sensitīvu termometru [4]. Tika arī piedāvātas metodes izmantošanai bio-magnetometrijā, [5] kas varētu būt noderīgas bioloģiskajos un medicīniskajos pētījumos.

Bez metroloģiskiem pielietojumiem, NV centri varētu būt potenciāli izmantojami kvantu skaitļošanā kā kubiti. Neskatoties uz to, ka tā nav izolētā sistēma, tāpēc ir jāņem vērā apkārtējās struktūras, ar NV centru spīnu ir viegli manipulēt ar gaismu un ārējo lauku mikroviļņu diapazonā. Arī jāpiebilst, ka tas viss varētu būt darāms istabas temperatūrā [6].

Autora motivācija ir saistīta ar to, ka NV centriem ir ļoti plaša potenciāla pielietojamība nākotnē, un to pētniecības lauks arvien paplašinās, tāpēc ir jāistrādā teorētiskās metodes, kuras palīdzētu saprast NV centru struktūru un tajos notiekošo procesu dinamiku. Par NV centriem ir samērā maz teorētisko pētījumu, galvenokārt, tie ir *ab initio* (no pirmajiem principiem) pētījumi [14], tāpēc autors ir ieinteresēts modeļa izveidošanā, kas palīdzētu izprast NV centros notiekošo procesu dinamiku.

1.2 Darba mērķis

Darba mērķis ir izstrādāt matemātisko modeli NV krāsu centru spīna mijiedarbībai ar lāzera starojumu magnētiskajā laukā un ārējā mikroviļņu laukā un, izmantojot šo modeli, izpētīt enerģētisko līmeņu apdzīvotības dinamiku.

1.3 Darba uzdevumi

- Noformulēt krāsu centra spina mijiedarbības modeli ar lāzera starojumu.
- Izveidot atbilstošu lineāro vienādojumu sistēmu NV centra enerģētisko līmeņu apdzīvotībai, iegūt atrisinājumu, izpētīt to atkarību no uzdevuma parametru skaitliskajām vērtībām.
- Izpētīt enerģētisko līmeņu sašķelšanos ārējā laukā, atbilstoši papildināt modeli, ņemot vērā ārējo lauku izraisītos efektus.
- Izpētīt, kā mainīsies līmeņu apdzīvotība modeļa ietvaros magnētiskā un mikroviļņu lauka klātbūtnē, salīdzināt ar reālajiem eksperimentu datiem.

1.4 Autora ieguldījums

Autors veica esošās literatūras analīzi, formulēja modeli, izveidojot programmatūras rīku pakotē *Wolfram Mathematica* [7], modelēja enerģētisko līmeņu apdzīvotības dinamiku ārējo lauku ietekmē un interpretēja darba rezultātus.

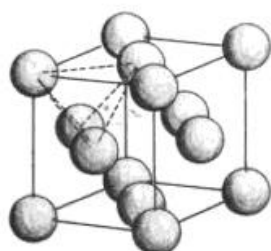
1.5 Darba struktūra

Darbā tika iekļautas sekojošas nodaļas: **ievadā** tiek sniegts īss pārskats par darba tēmu, aprakstīti darba mērķi un uzdevumi. **Literatūras apskatā** autors veica teorētisko apskatu par tēmām, kuras tika aktualizētas darbā. Nodaļā **modelēšana** autors aprakstīja darbā izmantoto metodiku, veica iegūto rezultātu analīzi. **Secinājumos** ir kopsavilkums par darba gaitā iegūtiem rezultātiem, kā arī piedāvāti tālākie pētniecības virzieni.

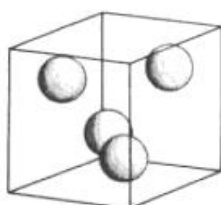
2. LITERATŪRAS APSKATS

2.1 NV centrs dimantā

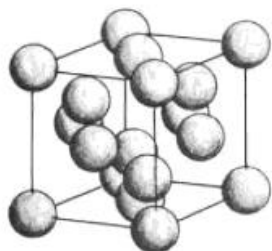
Dimantam ir kubiskā fcc struktūra ar režģa konstanti $a_0 = 3.56679 \text{ \AA}$ [8]. Dimanta struktūru var veidot no malas centrētā Bravē režģa šūnas, pievienojot papildus 4 atomus kuba



Malas centrētā
kubiskā struktūra

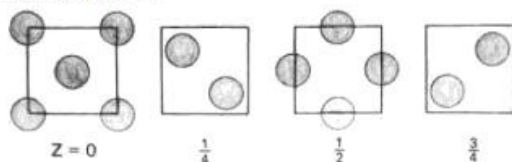


Atomi četrās astotdaļās

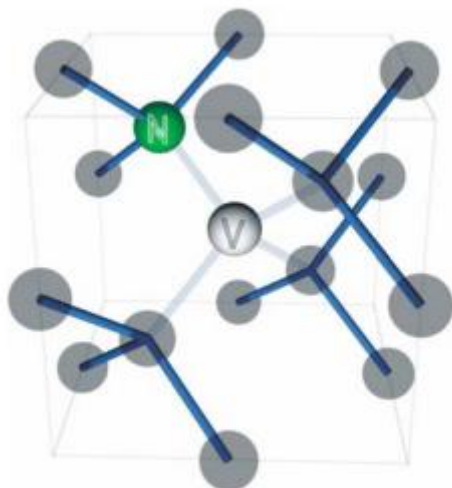


Dimanta kubiskā struktūra

Plakņu šķērs griezumumi



Ilustrācija 2.1.1. Dimanta režģa struktūra [8].



Ilustrācija 2.1.2. NV centra struktūras shematiskā reprezentācija [13].

astotdaļu centros, kuri mijas ar 4 tukšām astotdaļām [9], tā ir parādīta ilustrācijā 2.1.1. Primitīvā šūna satur 8 atomus, kuri atrodas pozīcijās $0,0,0$; $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$; $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$.

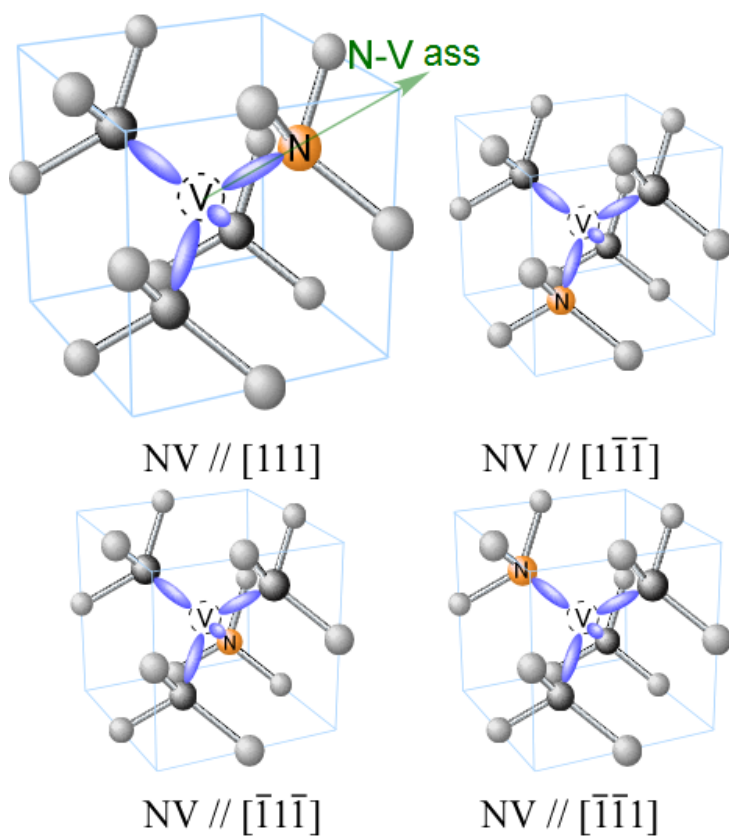
Slāpekļis ir visizplatītākais piemaisījums dimantā, kurš var aizņemt līdz pat 1% dimanta masas [10]. Ja viens slāpekļa atoms aizvieto vienu oglekļa atomu, veidojas tā saucamais P1 centrs, kurš nav optiski aktīvs. Tā kā slāpekļis ir pentavalents, tas sapārojas ar blakus esošajiem slāpekļa atomiem, un viens elektrons paliek nesapārots, tātad P1 centrs darbojas kā elektronu donors [11]. Ja viens no tuvākajiem slāpekļa

atomiem tiek aizvietots ar vakanci, tad trīs oglekļa elektroni veido kovalentās saites ar trim oglekļa atomiem, atstājot divus elektronus nesapārotus [12]. Šāds veidojums tiek saukts par NV krāsu centru un ir parādīts ilustrācijā 2.1.2.

NV centrs ar pieciem elektroniem, kur viens no tiem ir nesapārots, tiek apzīmēts kā NV^0 . Ja vakance saķer vienu papildus elektronu, tad tādu konfigurāciju sauc par NV^- [14]. Respektīvi, NV^0

centrs ir sistēma ar spinu $S=1/2$ un NV^- centrs ir sistēma ar spinu $S=1$.

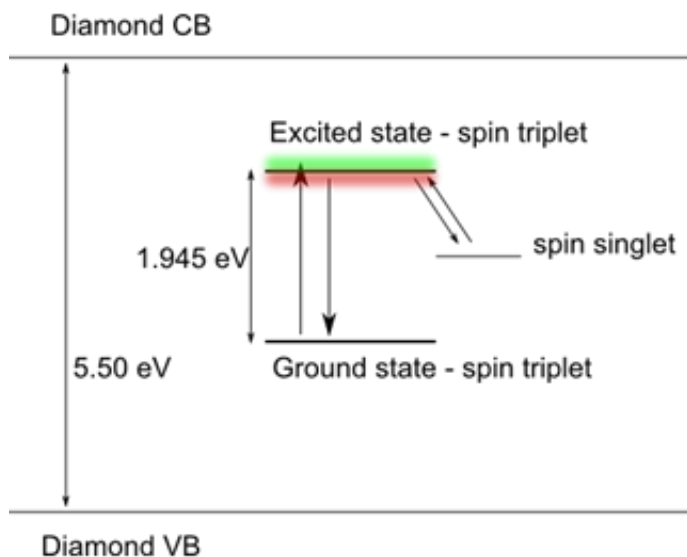
NV centram ir C_{3v} punktu grupas simetrija, kas nozīmē 120° simetrisko rotāciju ap NV centra asi un simetriski atstarojas pret jebkuru plakni, kura satur NV centra asi un C atomu. Ir četras iespējamās NV centru telpiskā orientācija telpā [15], kuras ir parādītas ilustrācijā 3.



Ilustrācija 3. NV centra iespējamās telpiskās orientācijas [15]

2.2 NV centru optiskās (enerģētiskās) īpašības

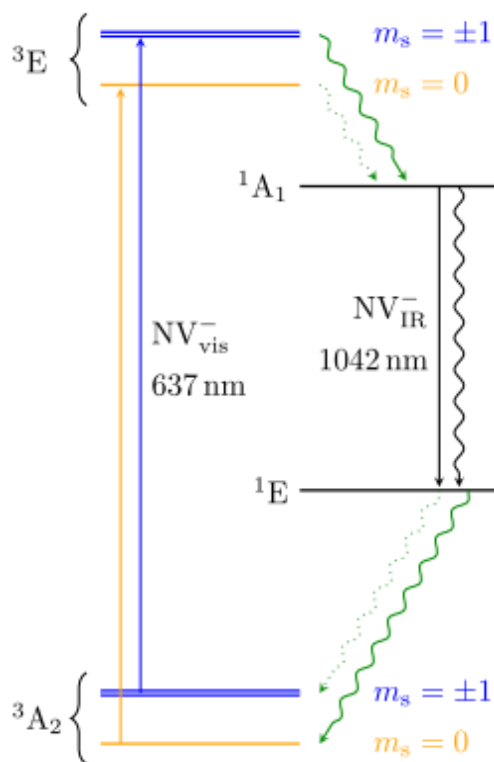
Kā zināms, dimantam ir plata aizliegtā zona (5.5 eV), un NV centra optiski aktīvie enerģētiskie līmeņi atrodas tās dziļumā tā, kā tas ir parādīts ilustrācijā 2.2.1. Precīzāka līmeņu struktūra ir apskatāma ilustrācijā 2.2.2.



Ilustrācija 2.2.1. NV centra atrašanās vieta dimantā, kur CB - vadāmības zona un VB – valences zona. [18]

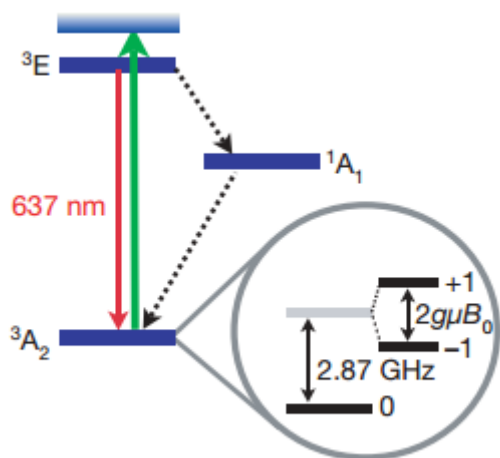
enerģijai $E = 1.95$ eV). No ierosinātā stāvokļa NV centrs var relaksēt divos veidos – tiešā tripleta-tripleta pārejā, starojot plašā enerģiju diapazonā (sarkanā luminiscence) ar $\lambda_{ZPL} = 637$ nm, vai bezstarojuma pārejā caur singletiem [19]. Ir jāpiemin, ka NV centrs ir perfekti fotostabils istabas temperatūrā, un fluorescences spektrs kā funkcija no laika nemainās pat pie lielām ierosinošā lāzera intensitātēm. [20]

Tā kā NV centram $S=1$, tam ir tripleta struktūra gan pamatstāvoklī (3A_2), gan ierosinātā stāvoklī (3E) [16]. Starp tiem atrodas divi singleta līmeņi 1A_1 un 1E , kuru izvietojums nav zināms, tomēr ir precīzi zināma enerģiju starpība – 1042 nm (1.19 eV, 9597 cm^{-1}) [17]. NV centrs ir ierosināms no 3A_2 pamatstāvokļa uz 3E ierosināto stāvokli ar spina saglabāšanos (visefektīvāk ir izmantot zaļo gaismu ar viļņu garumu 637 nm, kas atbilst pārejas



Ilustrācija 2.2.2. NV centra enerģētisko līmeņu struktūra [17]

2.3 NV centru spinu polarizācija ar gaismu



Ilustrācija 2.3.1. NV centra enerģētisko līmeņu detalizētāka shēma [21].

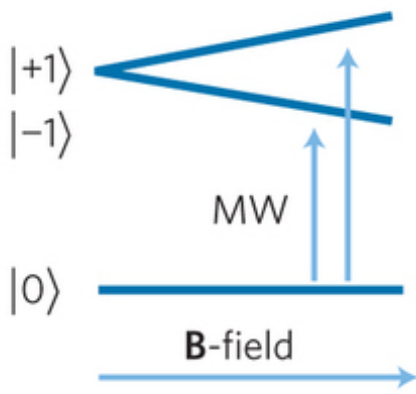
pārējās spins galvenokārt saglabājās ($\Delta m_s = 0$), tad bezstarojuma pārējām uz 1A_1 un pēc tam uz 1E līmeni ir izteikti selektīvs raksturs. Pārējas varbūtība no stāvokļa $m_s = 0$ ir ievērojami mazāka par pārējas varbūtību no stāvokļiem ar $m_s = \pm 1$ [23]. Un pretēji, no singleta stāvokļa relaksācija ar lielāko varbūtību notiek uz pamatstāvokļa apakšlīmeni ar $m_s = 0$. Šie spina selektīvie procesi nodrošina to, ka lielāka daļa ierosināto defektu atgriezīsies uz pamatstāvokļa apakšlīmeni ar $m_s = 0$ neatkarīgi no tā, kāds spins tam bija iepriekš. [19]. Neskatoties uz to, ka abas tripleta-singleta un singleta-tripleta pārejas ir selektīvas, lielākajā mērā optisko polarizāciju ietekmē $^3E - ^1A_1$ pāreja, salīdzinot ar $^1E - ^3A_2$ pāreju [23].

Kā jau bija konstatēts, negatīvi lādētam NV centram ir spins $S = 1$. Magnētisko dipolu mijiedarbības dēļ, pat bez ārējā magnētiskā lauka iedarbības, magnētiskie apakšlīmeņi $m_s = 0$ un $m_s = \pm 1$ ir attālumā $D = 2.87$ GHz, kas ir precīzi noteikts no eksperimentiem (ilustrācija 2.3.1.). Pateicoties simetrijai, $B = 0$ magnētiskajā laukā līmeņi $m_s = \pm 1$ ir deģenerēti [22].

NV centru dinamikā ļoti liela nozīme ir singleta stāvokļiem. Tiešām, ja optiskajās

2.4 Optiski detektēta magnētiskā rezonanse (ODMR)

Ar mērķi eksperimentāli novērot NV centru spinu rezonances lieto fiksēto lāzera starojumu un mikroviļņu frekvences starojumu. Notiek skenēšana kādā mikroviļņu (MW) frekvenču diapazonā. Kad MW starojums nav rezonansē ar pāreju starp līmeņiem ar $m_s = 0$ un $m_s = \pm 1$, lāzera starojums efektīvi pumpē NV centru apdzīvotību uz $m_s = 0$, kas nozīmē, ka fluorescences intensitāte ir maksimāla. Kad MW starojums sasniedz rezonanses frekvenci, kura atbilst attālumam starp $m_s = 0$ un $m_s = \pm 1$ līmeņiem (iepriekšējā apakšnodaļā tika minēts, ka tas ir precīzi zināms un ir $D = 2.87$ GHz), sākas pārējas starp šiem apakšlīmeņiem, un rezultātā fluorescences intensitāte samazinās [24].

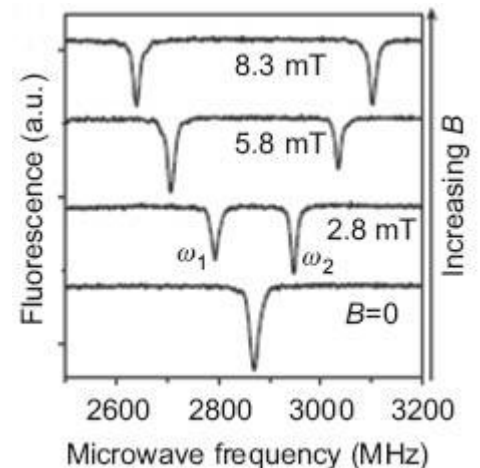


Ilustrācija 2.4.1. NV centra enerģētisko līmeņu sašķelšana magnētiskajā laukā [25].

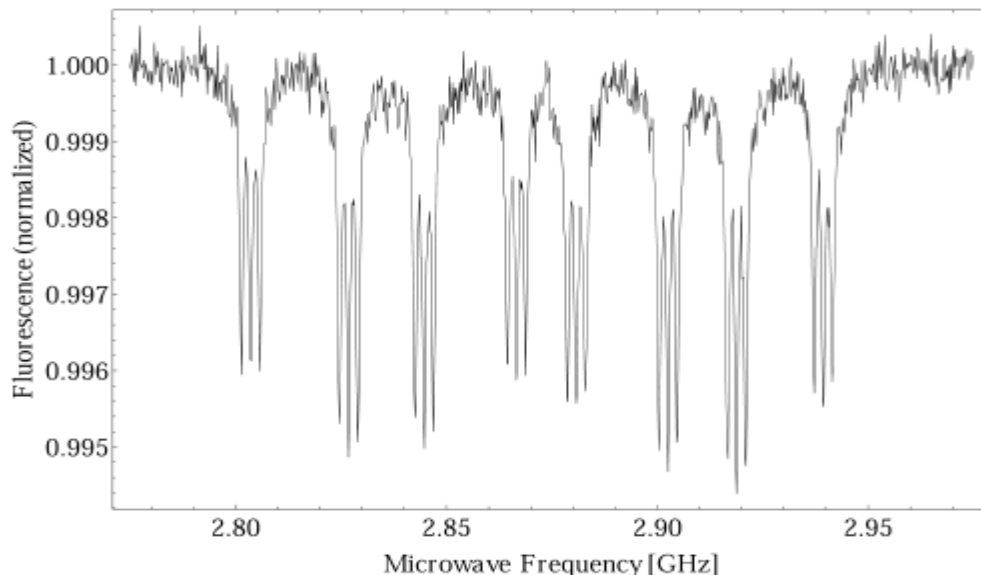
fluorescences intensitāte samazinās. Respektīvi, ODMR spektrā var novērot 2 minimumus, kad fluorescences intensitāte kļūst mazāka, kuras ir saistītas ar $m_s = \pm 1$ līmeņu sašķelšanu magnētiskajā laukā [26]. Piemērs ir apskatāms ilustrācijā 2.4.2.

NV centram ir 4 iespējamās orientācijas telpā, tāpēc vispārīgā gadījumā pie nulles magnētiskā lauka būs novērojami 8 pīķi (ilustrācija 2.4.3.) [26].

Magnētiskā lauka B NV centra ass virzienā pielikšana noved pie Zēmana enerģijas nobīdes par $\Delta E = g\mu_B B$, kur $g = 2$ ir NV centra Landē faktors, μ_B ir Bora magnetons. Tā kā bija pieņemts, ka magnētiskā lauka virziens sakrīt ar NV centra asi, B ir magnētiskā lauka absolūtā vērtība. $m_s = \pm 1$ sašķēlas tā, kā tas ir parādīts ilustrācijā 2.4.1 [25]. $m_s = \pm 1$ līmeņi vairs nav deģenerēti, un tādēļ, kad oscilējošā lauka frekvence ir vienāda ar starpību starp kādu no līmeņiem $m_s = 1$ vai $m_s = -1$, notiek repopulācija un

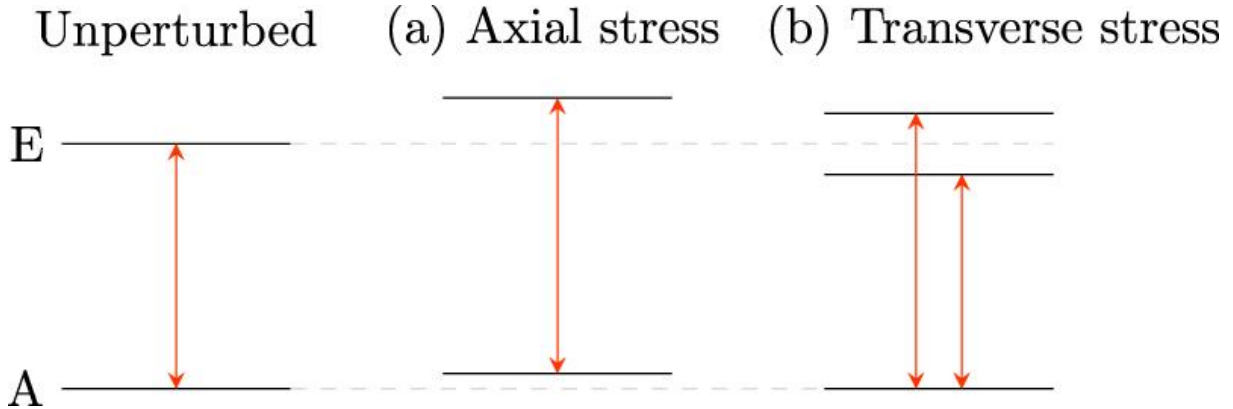


Ilustrācija 2.4.2. ODMR spektrs vienam NV centram pieaugošā magnētiskā laukā (virzienā no lejas uz augšu) [22].



Ilustrācija 2.4.3. ODMR spektrs 4 dažādām NV centra orientācijām. Papildus sašķelšana ir saistīta ar trim dažādām ^{14}N hipersīkstruktūras pārējām [26].

NV centra enerģētisko līmeņu novietojumu var ietekmēt arī sprieguma lauks, tas nozīmē, ka ar NV centru palīdzību ir iespējami mērīt iekšējo spriegumu dimanta kristālā un citus lielumus, kuri ir atkarīgi no sprieguma, piemēram, temperatūru [26, 27]. Spriegumu laukā jau pie $B = 0$ magnētiskā lauka $m_s = \pm 1$ apakšlīmeņi nav deģenerēti [17] (ilustrācija 2.4.4.).



Ilustrācija 2.4.4. NV centra enerģētiskie līmeņi spriegumu laukā. (a) Spriegums ir vērsts paralēli simetrijas asij. (b) Spriegums ir vērsts perpendikulāri simetrijas asij [17].

Enerģētisko līmeņu nobīdes aprakstam tiek lietots sekojošs Hamiltoniāns (neņemot vērā hipersīkstruktūras izraisītos efektus):

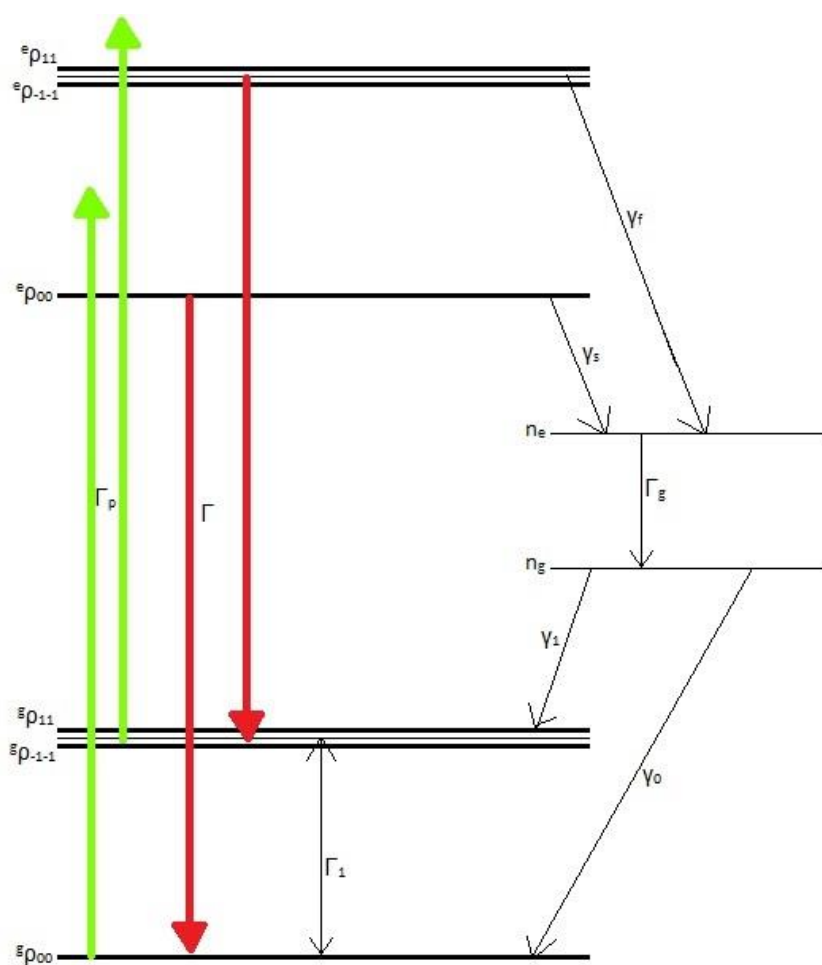
$$\hat{H} = DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2) + g\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (2.1)$$

z ir NV centra kvantēšanas ass, D un E ir nulles lauka sašķelšanas parametri, S_x , S_y un S_z apraksta spinu, g ir Landē faktors un μ_B – Bora magnetons. D ir vienāds ar 2.87 GHz, un apraksta divu nesapārotu elektronu spinu mijiedarbību. Parametrs E rodas no lokāliem spriegumiem, kuri nojauc C_{3v} simetriju, turklāt trešais Hamiltoniāna loceklis apraksta Zēmana efekta ietekmi [19]. Spina enerģiju īpašvērtību mērīšana magnētiskā lauka klātbūtnē ir magnētiskās magnetometrijas pamats [28].

3. MODELĒŠANA

3.1 Enerģētisko līmeņu apdzīvotības modelēšana lāzera starojumā

Negatīvi lādētam NV centram ir viens nesapārots elektrons no slāpekļa atoma un viens elektrons vakancē, kurš bija piesaistīts no ārpuses, kas dod kopējo spinu $S = 1$ NV centram atrodoties pamatstāvoklī [14]. Bez pamatstāvokļa tripleta un ierosinātā stāvokļa tripleta sistēma var nonākt arī singleta stāvokļos, starp kuriem sistēma var relaksēt no ierosinātā stāvokļa [19]. Autors attēloja šo līmeņu struktūru un pārejas starp tiem uz ilustrācijas 3.1.1. ar tiem apzīmējumiem, kurus lietoš tālākajā modelēšanā.



Ilustrācija 3.1.1. Modelēšanas procesā izmantotie apzīmējumi.

Tagad mērķis ir sastādīt lineāro vienādojumu sistēmu

$$AX = B \quad (3.1)$$

kur A ir parametru matrica (respektīvi, pāreju ātrumi starp līmeņiem), X ir nezināmo matrica (līmeņu apdzīvotība) un B ir brīvo locekļu matrica, kura apzīmē atbilstošā līmeņa apdzīvotības izmaiņas ātrumu.

Lineāro vienādojumu sastādīšanai tika izveidota nezināmo matrica:

$$X = \begin{pmatrix} \rho^g_{00} \\ \rho^g_{-1-1} \\ \rho^g_{11} \\ \rho^e_{00} \\ \rho^e_{-1-1} \\ \rho^e_{11} \\ n^e \\ n^g \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

Augšējais indekss g nozīmē pamatstāvokli, augšējais indekss e nozīmē ierosināto stāvokli, ar ρ tiek apzīmēti tripletu līmeņi, un ar n – singletu līmeņi. Visi šie apzīmējumi tika parādīti ilustrācijā 3.1.1.

Lineāro vienādojumu sastādīšanai tika izveidota arī parametru matrica:

$$A = \begin{pmatrix} -2\Gamma_1 - \Gamma_p & \Gamma_1 & \Gamma_1 & \Gamma & 0 & 0 & 0 & \gamma_0 \\ \Gamma_1 & -\Gamma_1 - \Gamma_p & 0 & 0 & \Gamma & 0 & 0 & \gamma_1 \\ \Gamma_1 & 0 & -\Gamma_1 - \Gamma_p & 0 & 0 & \Gamma & 0 & \gamma_1 \\ \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_f & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_f & \gamma_s & \gamma_s & -\Gamma_g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Gamma_g & -\gamma_0 - \gamma_1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Parametri tika parādīti ilustrācijā 3.1.1., to atšifrējums tiek dots tabulā 3.1.1., un skaitliskās vērtības, zināmas no eksperimentiem, ir aplūkojamas tabulā 3.1.2.

Parametrs	Atšifrējums
γ_f	Pāreja no ierosinātiem stāvokļiem ar $m_s = \pm 1$ uz singleta stāvokļiem
γ_s	Pāreja no ierosinātiem stāvokļiem ar $m_s = 0$ uz singleta stāvokļiem

Γ_g	Pāreja no ierosinātā singleta stāvokļa uz singleta pamatstāvokli
Γ_p	Pumpēšanas ātrums, ko maina eksperimentators
Γ_1	Pārejas starp pamatstāvokļa līmeņiem ar $m_s = 0$ un $m_s = \pm 1$
Γ	Relaksācija tripleta-tripleta pārejai
γ_1	Relaksācija no singleta stāvokļa uz pamatstāvokļiem ar $m_s = \pm 1$
γ_0	Relaksācija no singleta stāvokļa uz pamatstāvokļiem ar $m_s = \pm 0$

Tabula 3.1.1. Lineāro vienādojumu sistēmā izmantoto parametru atšifrējums.

Tā kā tiek apskatīts stacionārais gadījums, kad lāzers jau spīd pietiekoši ilgi, lai iestātos līdzsvars, jārisina homogēns lineārais vienādojums veida $AX = B$, kur $B = 0$.

Līmeņu apdzīvotība tika normēta uz 1, tātad galīga lineāro vienādojumu sistēma izskatās šādi:

$$\begin{pmatrix} -2\Gamma_1 - \Gamma_p & \Gamma_1 & \Gamma_1 & \Gamma & 0 & 0 & 0 & \gamma_0 \\ \Gamma_1 & -\Gamma_1 - \Gamma_p & 0 & 0 & \Gamma & 0 & 0 & \gamma_1 \\ \Gamma_1 & 0 & -\Gamma_1 - \Gamma_p & 0 & 0 & \Gamma & 0 & \gamma_1 \\ \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_f & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_f & \gamma_s & \gamma_s & -\Gamma_g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Gamma_g & -\gamma_0 - \gamma_1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \rho^g_{00} \\ \rho^g_{-1-1} \\ \rho^g_{11} \\ \rho^e_{00} \\ \rho^e_{-1-1} \\ \rho^e_{11} \\ n^e \\ n^g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Γ_p ir lāzera pumpēšanas ātrums, ko maina eksperimentators. Pārējās parametru vērtības tika ņemtas no publikācijas [29] un ir apkopotas tabulā 3.1.2.

Parametrs	Vērtība
γ_f	$53 \mu s^{-1}$
γ_s	$7.9 \mu s^{-1}$
Γ_g	$1000 \mu s^{-1}$

Γ_1	$\frac{1}{2900} \mu s^{-1}$
Γ	$66 \mu s^{-1}$
γ_1	$0.7 \mu s^{-1}$
γ_0	$1 \mu s^{-1}$

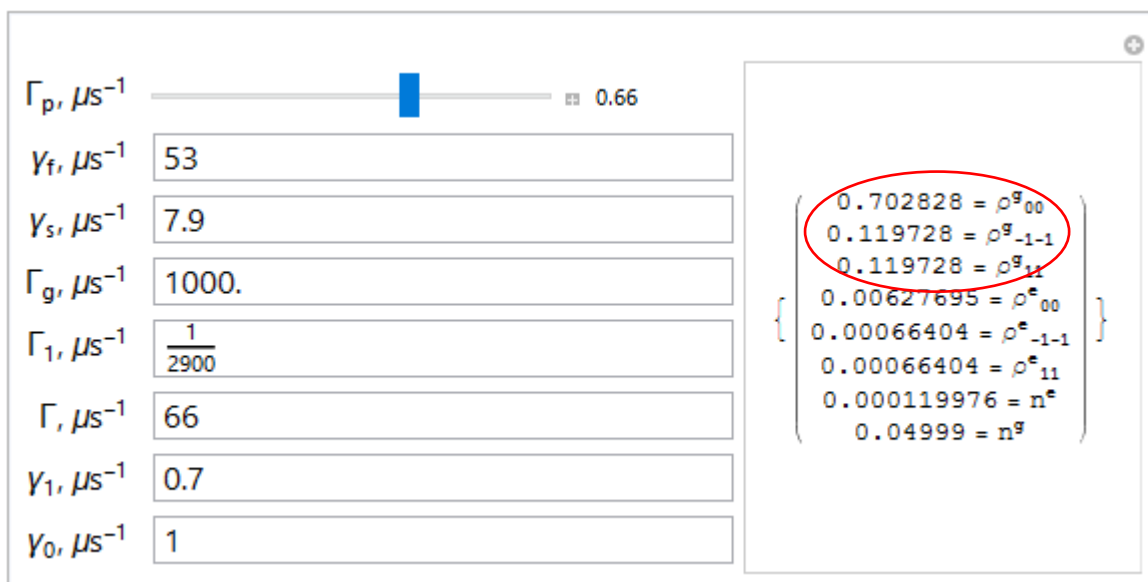
Tabula 3.1.2. Fotofizikālie parametri aplūkotajai sistēmai, kurus nomērīja publikācijas [29] autori.

Tika atrasta arī cita publikācija [30], kurā tika mērīti tie paši fotofizikālie parametri, bet tas tika darīts pie kāda noteikta leņķa, kas autora izveidotajam modelim nav noderīgs, taču ļauj novērtēt vērtību lielumu atbilstību pēc vērtības kārtas. Publikācijas [30] autoru rezultāti ir aplūkojami tabulā 3.1.3., no kuriem var secināt, ka tālāk izmantotās parametru vērtības ir ticamas.

	NV C	NV D	NV E	NV F
$\theta (deg)$	35±1	74±1	55±1	36±1
$\gamma_f, \mu s^{-1}$	50.7±4.4	60.7±6.6	53.0±5.9	48.6±1.9
$\gamma_s, \mu s^{-1}$	6.4±2.3	10.8±4.1	9.3±3.0	5.2±0.8
$\Gamma, \mu s^{-1}$	67.7±3.4	63.2±4.6	63.7±4.5	69.1±1.6
$\gamma_1, \mu s^{-1}$	0.6±0.3	0.4±0.2	0.5±0.2	1.4±0.2
$\gamma_0, \mu s^{-1}$	0.7±0.5	0.8±0.6	0.9±0.8	1.5±0.5

Tabula 3.1.3. Fotofizikālie parametri aplūkotajai sistēmai, kurus nomērīja publikācijas [30] autori. NV C, NV D, NV E un NV F atbilst dažādām NV centra orientācijām telpā.

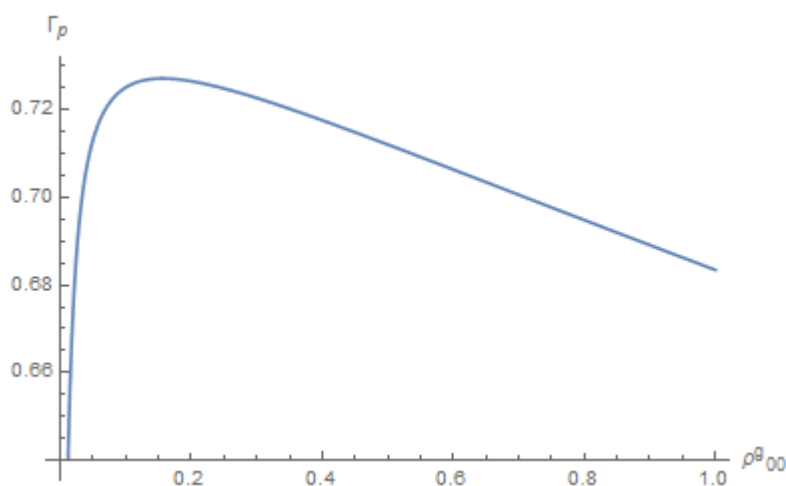
Pamatojoties uz tabulas 3.1.2. datiem un lineāro vienādojumu sistēmas atrisināšanu, programmatūras paketē *Wolfram Mathematica* [7], tika izveidots rīks relatīvo enerģētisko līmeņu apdzīvotības noteikšanai atkarībā no lāzera starojuma pumpēšanas Γ_p , piemēru var aplūkot ilustrācijā 3.1.2. Kods līmeņu apdzīvotības noteikšanai ir pievienots 1. pielikumā.



Ilustrācija 3.1.2. Rīka izmantošanas piemērs pie $\Gamma_p = 0.66 \mu s^{-1}$

Varam veikt dažus novērojumus no ilustrācijas 3.1.2. Vairākums daļiņu (ap 70%) ir sapumpētas pamatstāvokļa līmenī ar $m_s = 0$, ko arī vajadzēja panākt. Pamatstāvokļa līmeņi ar $m_s = \pm 1$ ir apdzīvoti vienādi, kā tam vajadzētu būt.

Attēlojot līmeņa ρ_{00}^g apdzīvotību atkarībā no Γ_p , uz grafika varam atrast tādu Γ_p vērtību, pie kuras būs panākta maksimālā ρ_{00}^g apdzīvotība (grafiks 3.1.1.).

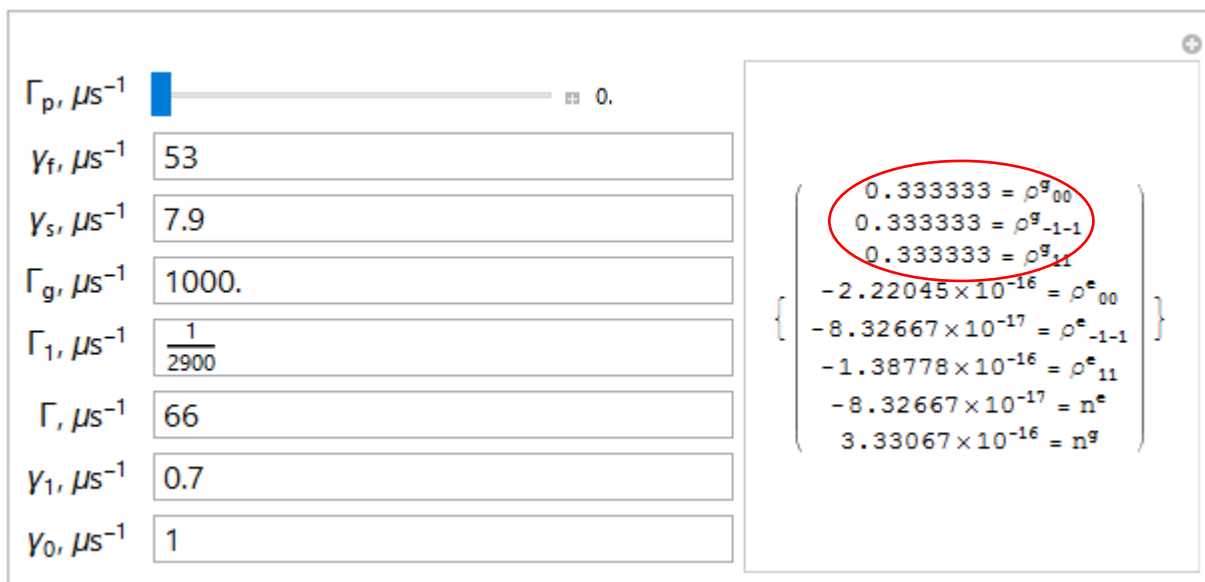


Grafiks 3.1.1. ρ_{00}^g atkarība no Γ_p

No grafika 3.1.1. ir nolasāms, ka vislielākā ρ_{00}^g vērtība tiek panākta pie $\Gamma_p = 0.156 \mu s^{-1}$, šajā gadījumā līmeņa ρ_{00}^g apdzīvotība ir 72.7% no visas sistēmas apdzīvotības. Optimālais Γ_p diapazons ir apmēram no $\Gamma_p = 0.14 \mu s^{-1}$ līdz $\Gamma_p = 0.19 \mu s^{-1}$.

3.2 Modeļa testēšana pie dažādām parametru vērtībām

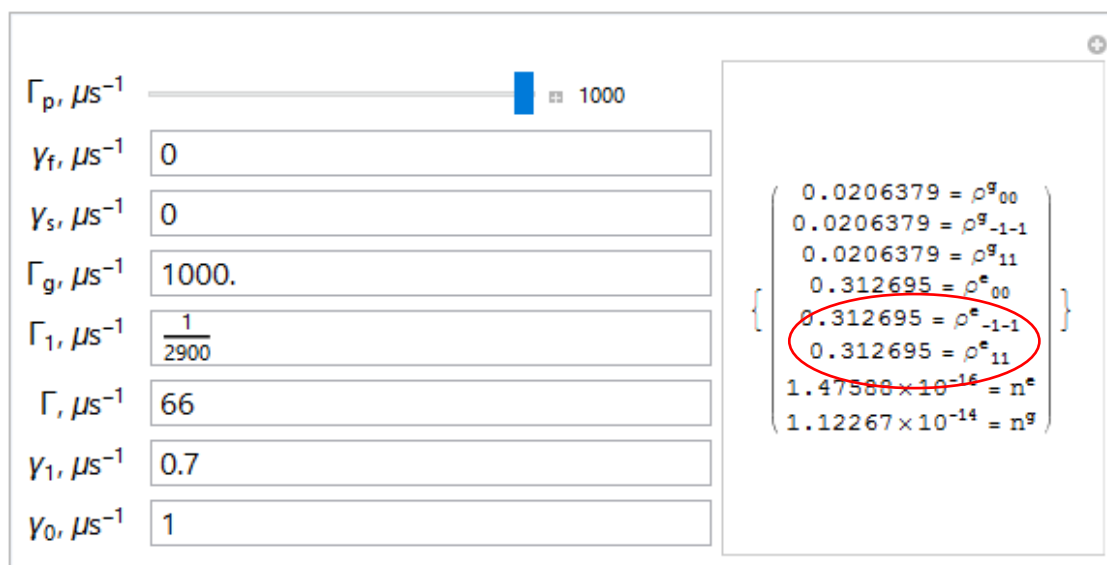
Novērtēsim, kā strādā modelis dažādos gadījumos, kuros rezultāts ir paredzams. Ilustrācijā 3.2.1 var apskatīt situāciju, kad $\Gamma_p = 0$, tas nozīmē, ka lāzera starojums uz sistēmu neiedarbojas. Paredzamais rezultāts ir tāds, ka būs apdzīvoti tikai pamatstāvokļa līmeņi, pie tā katra līmeņa apdzīvotība bus apmēram vienāda ar 1/3.



Ilustrācija 3.2.1. Gadījums ar $\Gamma_p = 0 \mu s^{-1}$

No ilustrācijas 3.2.1 varam redzēt, ka tiešām visas daļiņas ir sagrupējušās pamatstāvoklī.

Tagad pieņemsim, ka relaksācija starp singletiem nenotiek, tas ir, notiek tikai tripleta-tripleta pārējas. Modeļa ietvaros tas nozīmē, ka $\gamma_s = 0$ un $\gamma_f = 0$. Paredzams, ka galvenokārt būs apdzīvoti ierosinātā stāvokļa līmeņi. Rezultāts ir aplūkojams ilustrācijā 3.2.2.



Ilustrācija 3.2.2. Gadījums ar $\gamma_s = 0 \mu s^{-1}$ un $\gamma_f = 0 \mu s^{-1}$

Ilustrācijā 3.2.2. varam redzēt, ka, kaut pamatstāvokļa līmeņi nav pilnībā iztukšoti, galvenokārt ir apdzīvoti ierosinātā stāvokļa enerģētiskie līmeņi (apmēram pa 31% no visu daļiņu skaita katrā).

Arī iespējama gadījums ir tāds, ka Γ_p kļūst ļoti liels salīdzinājumā ar visiem pārējiem ātrumiem (pimēram, $\Gamma_p = 1000 \mu s^{-1}$). γ_0 un γ_1 ir ievērojami mazāki par Γ , γ_f un γ_s , kas rada “pudeles kakla” efektu, daļiņas nespēs relaksēt no n_g līmeņa. Tātad paredzamais rezultāts ir tāds, ka daļiņas galvenokārt “sakrāsies” uz n_g līmeņa. Rezultāts ir aplūkojams ilustrācijā 3.2.3.

Ilustrācijā 3.2.3 tiešām var redzēt, ka līmeņa n_g apdzīvotība ir apmēram 85% no visu



Ilustrācija 3.2.3. Robežgadījums ar $\Gamma_p = 1000 \mu s^{-1}$

daļiņu skaita.

Šajā apakšnodaļā visi testēšanas rezultāti sakrīta ar paredzētajiem, kas liecina par to, ka šis modelis ir noderīgs tālākai izmantošanai un modificēšanai.

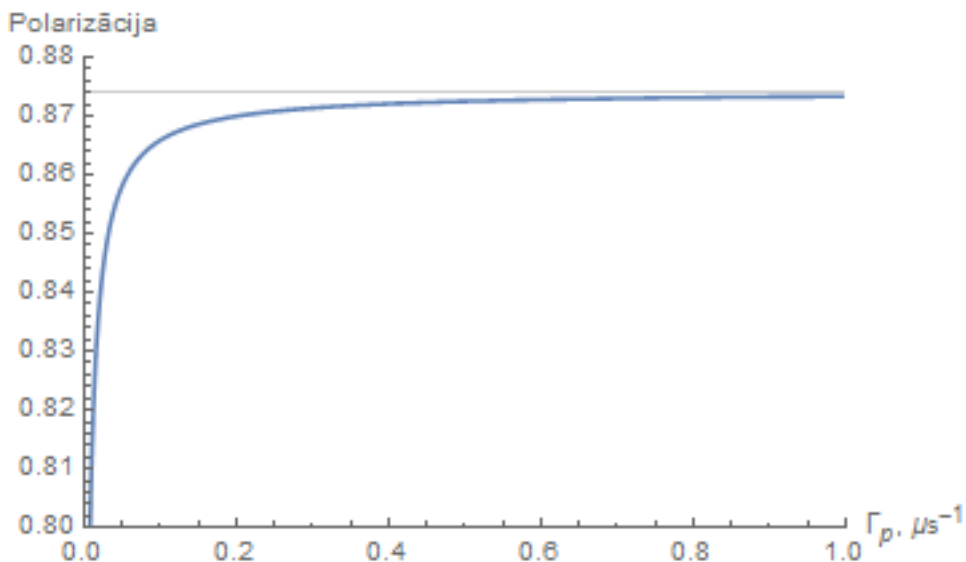
3.3 Spina polarizācija

Ieviesīsim lielumu, kurš raksturo cik apdzīvots pamatstāvokļa līmenis ar $m_s = 0$, salīdzinot ar $m_s = \pm 1$. Definēsim polarizāciju sekojošā veidā:

$$Polarizācija = \frac{\rho_{00}^g + \frac{1}{2}(-\rho_{-1-1}^g - \rho_{11}^g)}{\rho_{00}^g + \rho_{-1-1}^g + \rho_{11}^g} \quad (3.5)$$

Polarizācija apraksta pamatstāvokļa daļiņu ar $m_s = 0$ attiecību pret visu daļiņu skaitu, kuras atrodas pamatstāvoklī. ρ_{00}^g apzīmē apdzīvotību pamatstāvoklī ar $m_s = 0$, ρ_{11}^g un ρ_{-1-1}^g apzīmē apdzīvotību pamatstāvokļa līmeņos ar $m_s = +1$ un $m_s = -1$ attiecīgi.

Attēlosim uz grafika polarizācijas atkarību no pumpēšanas ātruma Γ_p (grafiks 3.3.1.):



Grafiks 3.3.1. Polarizācijas atkarība no Γ_p .

Grafikā 3.3.1. var novērot, ka teorētiskais polarizācijas maksimums ir 87.4%, $\Delta = 5\%$ no maksimuma tiek sasniegts pie $\Gamma_p = 0.016 \mu s^{-1}$, $\Delta = 1\%$ no maksimuma tiek sasniegts pie $\Gamma_p = 0.095 \mu s^{-1}$, kas ir pat nedaudz mazāks par $\Gamma_p = 0.1 \mu s^{-1}$.

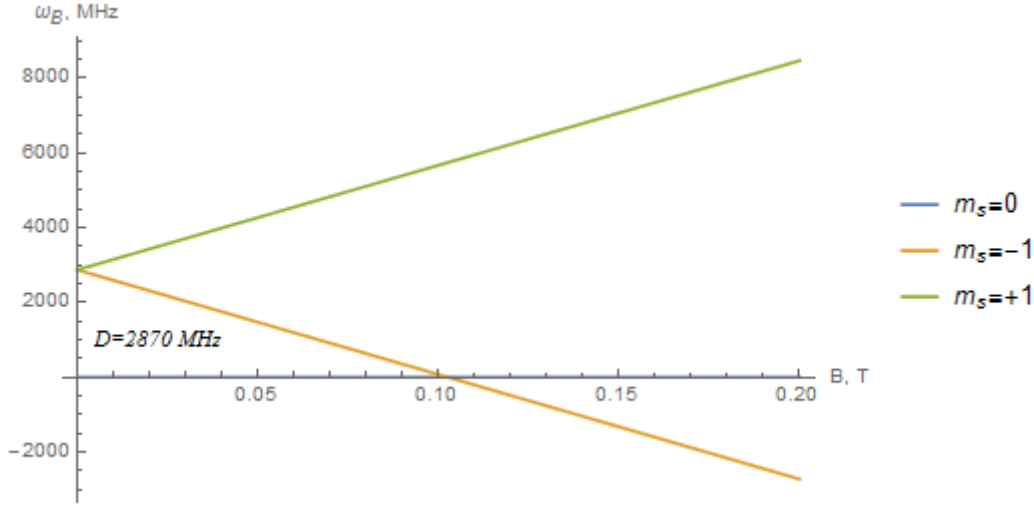
3.4 NV centrs ārējā magnētiskajā un mikroviļņu frekvences laukos

Lai atrastu enerģētisko līmeņu enerģijas magnētiskajā laukā, jāuzraksta Hamiltoniāns (pieņemot, ka tiek apskatīts ogleklis-12 ar kodola spinu $I = 0$ un ka kristālā nav iekšējo spriegumu):

$$\hat{H} = DS_z^2 + g\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (3.6)$$

Tātad vērā tiek ņemta tikai nulles lauka sašķelšanās parametrs D (pirmais vienādojuma loceklis) un Zēmana sašķelšana (otrais vienādojuma loceklis).

Atradot Hamiltoniāna (3.6) īpašvērtības, tiek iegūts līmeņu enerģiju sadalījums, kurš ir parādīts uz grafika 3.4.1. Atbilstošais *Mathematica* kods ir pielikumā 2.



Grafiks 3.4.1. Pamatstāvokļa magnētisko līmeņu sašķelšanās magnētiskajā laukā

Tiek ieviests jauns lielums Γ_1^{MW} , kurš mainās atkarībā no magnētiskā un ārējā MW lauka frekvencēm. Tas raksturo pārejas ātrumu starp pamatstāvokļa līmeņiem, kurš ir atkarīgs no magnētiskā lauka frekvences ω_B un mikroviļņu frekvences ω_{MW} . Tā kā ODMR spektriem labākā aproksimācija ir Lorenca kontūrs [20], tiek pieņemts, ka Γ_1^{MW} sadalījums ir Lorenca sadalījuma formā. Tātad Γ_1^{MW} formula ir sekojoša:

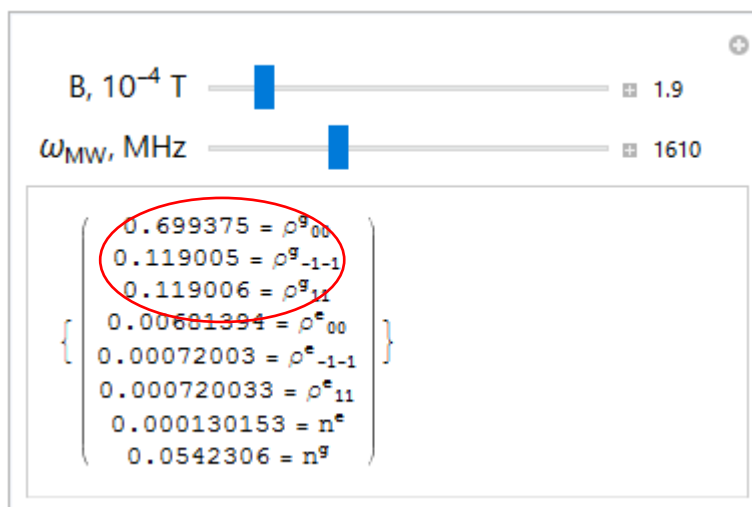
$$\Gamma_1^{MW} = \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + (\omega_B - \omega_{MW})^2} \Gamma_{10}^{MW} \quad (3.7)$$

Γ ir ātrums, kurš ir saistīts ar dabīgo līmeņu paplašinājumu, tas netika rēķināts modeļa ietvaros. Tā kā visi pārējie ātrumi ir MHz diapazonā, tika pieņemts, ka Γ arī ir ar kārtu ~MHz.

Atbilstoši ir jāpapildina parametru matrica (3.3). Parametrs Γ_1 nosaka pārejas ātrumu starp pamatstāvokļu līmeņiem, kad nav ārējo lauku ietekmes, tātad ātrums Γ_1^{MW} tiks atbilstoši pieskaitīts vai atņemts no Γ_1 . Rezultātā matrica (3.3) būs modificēta sekojošā veidā:

$$A = \begin{pmatrix} -2\Gamma_1 - 2\Gamma_1^{MW} - \Gamma_p & \Gamma_1 + \Gamma_1^{MW} & \Gamma_1 + \Gamma_1^{MW} & \Gamma & 0 & 0 & 0 & \gamma_0 \\ \Gamma_1 + \Gamma_1^{MW} & -\Gamma_1 - \Gamma_1^{MW} - \Gamma_p & 0 & 0 & \Gamma & 0 & 0 & \gamma_1 \\ \Gamma_1 + \Gamma_1^{MW} & 0 & -\Gamma_1 - \Gamma_1^{MW} - \Gamma_p & 0 & 0 & \Gamma & 0 & \gamma_1 \\ \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_f & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_p & 0 & 0 & -\Gamma - \gamma_s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_f & \gamma_s & \gamma_s & -\Gamma_g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Gamma_g & -\gamma_0 - \gamma_1 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Atbilstoši tika modificēts rīks enerģētisko līmeņu apdzīvotības noteikšanai, atbilstošais *Mathematica* kods ir pielikumā 3. Piemēru var apskatīt ilustrācijā 3.4.1.



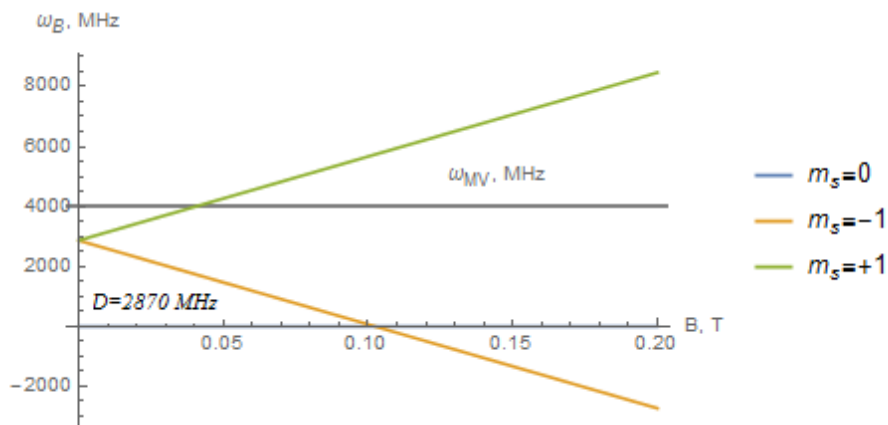
Ilustrācija 3.4.1. Modificētais rīks saskaņā ar (3.8) parametru matricu. Uzliktie lielumi nav rezonansē ar kādu no enerģijas starpībām starp $m_s = 0$ un $m_s = \pm 1$, tāpēc līmenis $\rho^{e_{00}}$ ir visapdzīvotāk.

Rezultātā tika iegūts modelis, kurš parāda, kā mainās NV centra līmeņu apdzīvotība, kad ir pielikti magnētiskais un ārējais MW lauki.

Tālākā analīze būs veikta ar grafiku palīdzību, jo tos ir vieglāk uztvert, nekā skaitļu masīvu. Apakšnodaļā 3.1 bija noskaidrots, ka vislielākā apdzīvotība pie magnētiskā lauka $B = 0$ tiek panākta pie $\Gamma_p = 0.156 \mu s^{-1}$, tāpēc tālākajos aprēķinos būs ņemts vērā tieši tāds pumpēšanas ātrums.

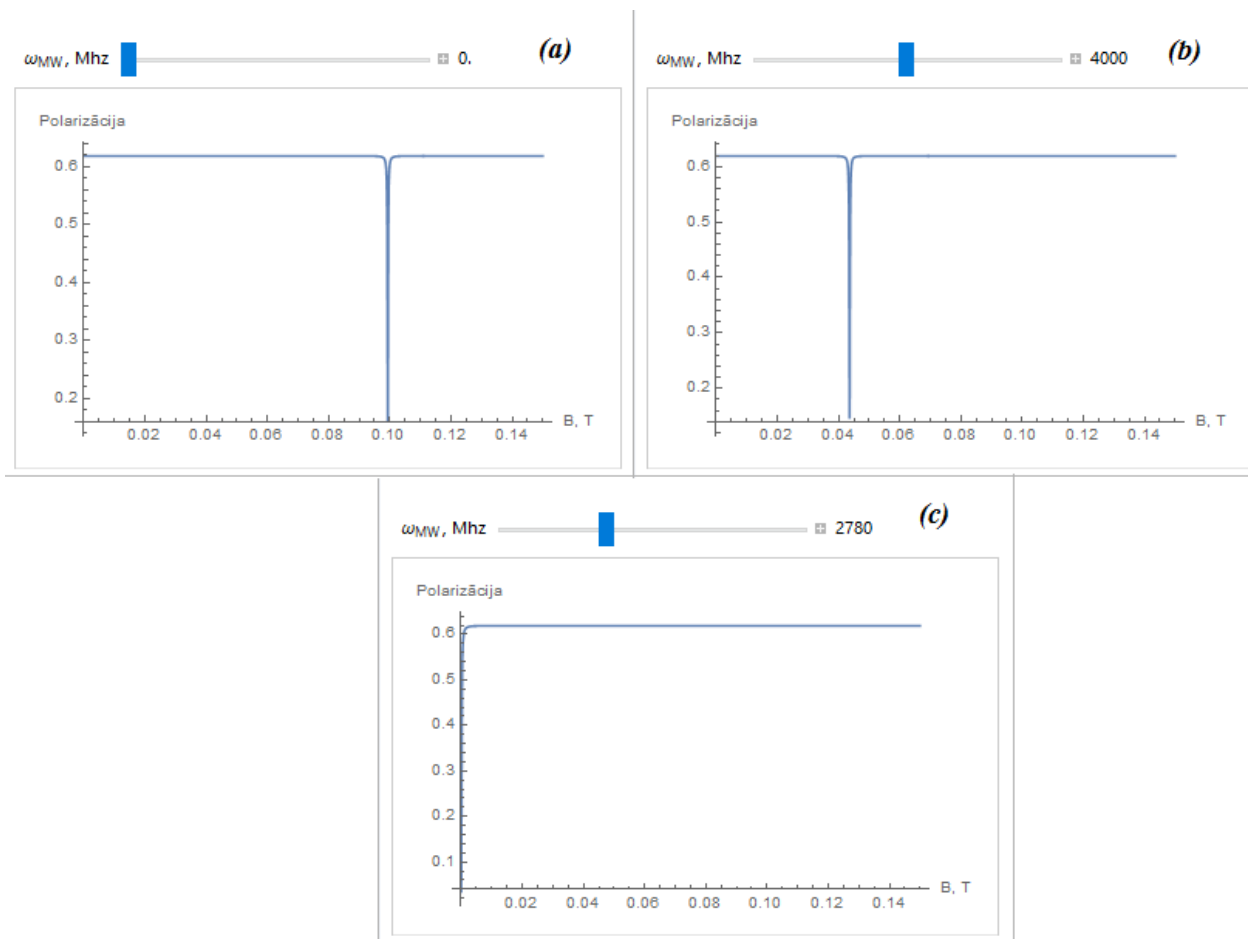
3.5 Modeļa testēšana

Vispirms pieņemsim, ka tiek mainīts magnētiskais lauks pie nemainīgas mikroviļņu lauka frekvences ω_B . Grafikā 3.5.1. ir redzams, ka pie patvaļīga ω_{MW} kāds no $m_s = \pm 1$ apakšlīmeņiem tiek krustots 1 reizi (vai krustojas nulles punktā ar abiem līmeņiem uzreiz, ja $\omega_{MW} = D$).



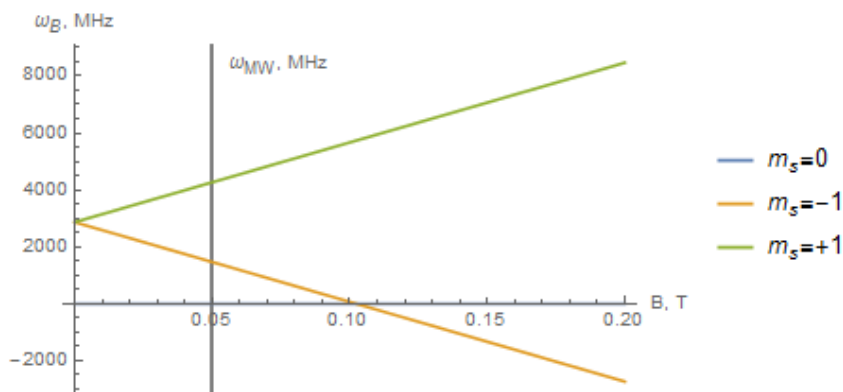
Grafiks 3.5.1. Pamatstāvokļa magnētisko līmeņu sašķelšanās magnētiskajā laukā ar pieliktu $\omega_{MW} = 4000 \text{ MHz}$

No grafika 3.5.1. var secināt, ka, skenējot magnētisko lauku kādā diapazonā, ir sagaidāms, ka polarizācija, un līdz ar to fluorescences intensitāte, ja tas būtu reāls eksperiments, samazināsies vienu reizi un būs redzams viens pīķis. Ilustrācijā 3.5.1. ir apskatāms kā mainās polarizācija pie dažādām fiksētām ω_{MW} frekvencēm (atbilstošais *Mathematica* kods ir pievienots pielikumā 4.).



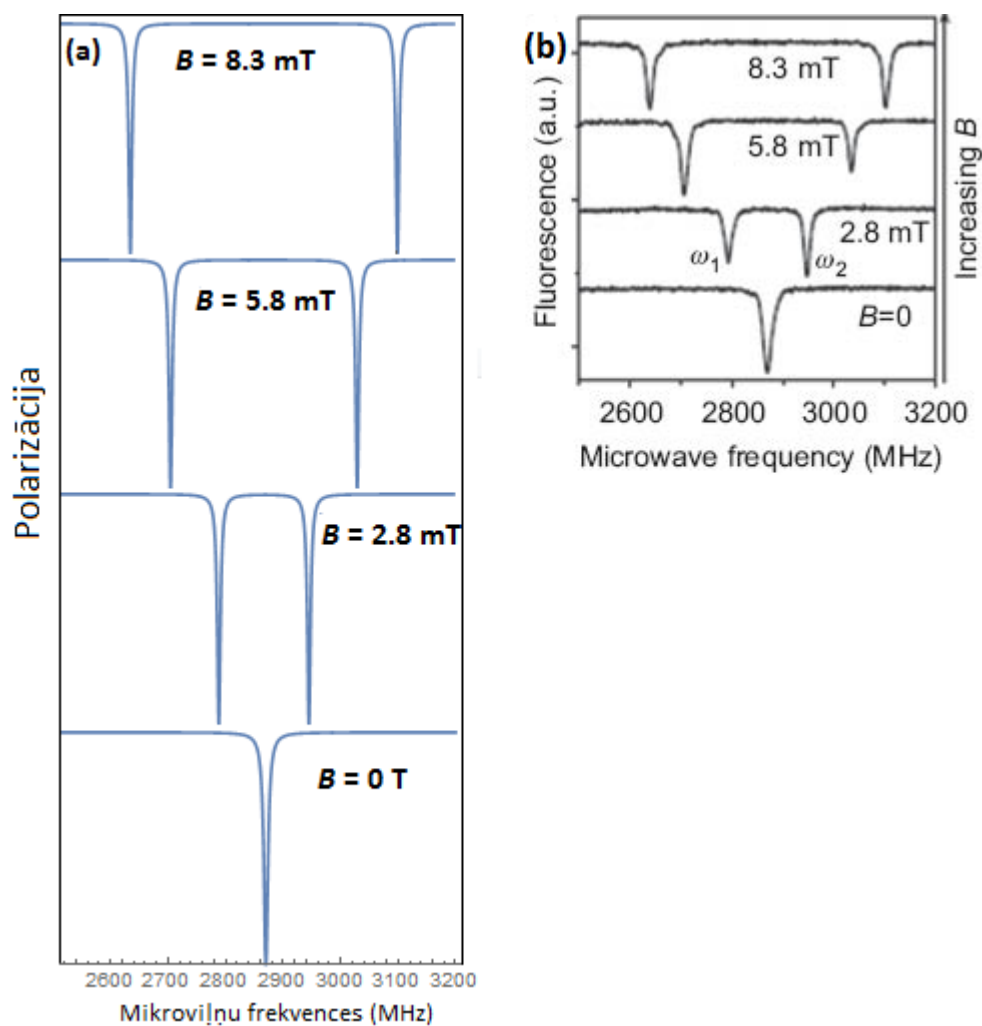
Ilustrācija 3.5.1. Polarizācija pie dažādiem ω_{MW} . (a) Ja pieliktā frekvence ir $\omega_{MW} = 0$ MHz, tad apdzīvotība mainās tikai pie tās B vērtības, kad ω_{MW} sakrītīs ar ω_B (apmēram 0.104 T). (b) Pieliktā frekvence atbilst grafikā 3.5.1. parādītai frekvencei $\omega_{MW} = 4000$ MHz. Redzams viens pīķis 0.04 T tuvumā, kas atbilst pārapdzīvotībai uz $m_s = +1$ apakšlīmeni. (c) Pieliktā frekvence sakrīt ar nulles lauka sašķelšanās parametru $D = 2780$ MHz, polarizācija samazinās $B = 0$ magnētiskā lauka tuvumā.

Tagad apskatīsim pretējo gadījumu, kad pie nemainīgā magnētiskā lauka mainās ω_{MW} . Tas ir tieši tas, kas ir darāms ODMR ietvaros. Grafikā 3.5.2. ir redzams, ka pie fiksēta ω_B kāds no $m_s = \pm 1$ apakšlīmeņiem tiek krustots 2 reizes (vai vienu reizi, ja $\omega_B = 0$, jo $m_s = \pm 1$ ir deģenerēti pie $B = 0$ magnētiskā lauka).



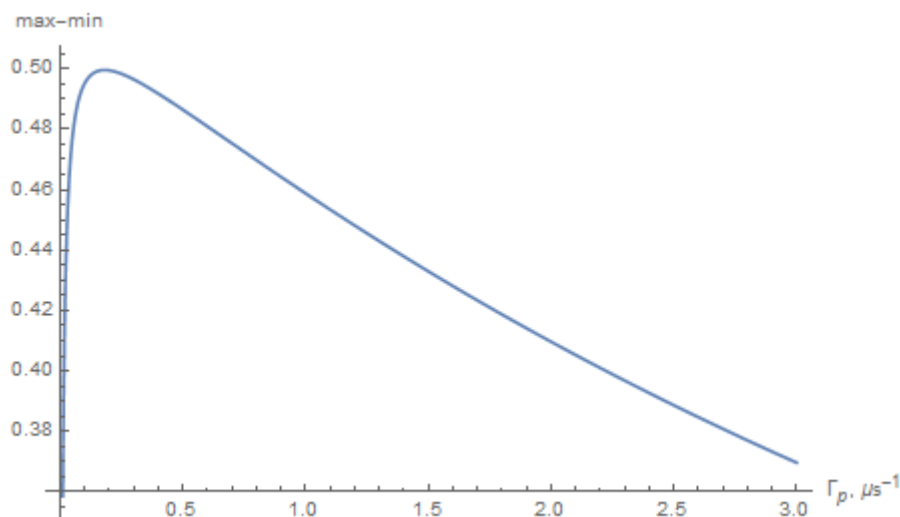
Grafiks 3.5.2. Pamatstāvokļa magnētisko līmeņu sašķelšanās magnētiskajā laukā ar pieliktu $B = 0.05$ T var redzēt, ka pie konstanta magnētiskā lauka ω_{MW} krusto katru no $m_s = \pm 1$ apakšlīmeņiem, tāpēc ir sagaidāmi 2 ODMR pīķi.

No grafika 3.5.2. var secināt, ka, mainot ārējo MW lauku kādā diapazonā pie nemainīga magnētiskā lauka, ir sagaidāms, ka polarizācija, un līdz ar to fluorescences intensitāte, samazināsies divas reizes un būs redzami 2 pīķi. Izņēmums ir situācija, kad $B = 0$, jo tad līmeņiem $m_s = \pm 1$ ir vienāda enerģija, un divi pīķi saplūdis vienā. Ilustrācijā 3.5.2. ir apskatāms, kā mainās polarizācija pie dažādām fiksētām ω_B frekvencēm (atbilstošais *Mathematica* kods ir pielikumā 5.) un to salīdzinājums ar reālajiem eksperimenta datiem no publikācijas [22].



Ilustrācija 3.5.2. Polarizācija pie dažādām magnētiskā lauka vērtībām. (a) Simulēti spektri autora veidotajā rīkā. (b) ODMR spektri vienam NV centram pieaugošā magnētiskā laukā no publikācijas [22].

Kad ir pārlicība, ka modelis dod rezultātus, salīdzināmus ar eksperimenta datiem, varam noteikt, kāds ir optimāls pumpēšanas ātrums Γ_p , kurš nodrošinātu labu kontrastainību ODMR spektros. Ar kontrastainību ir domāta starpība starp polarizācijas vērtību spektra maksimumā un vērtību spektra minimumā. Kā šī starpība ir atkarīga no Γ_p , var aplūkot grafikā 3.5.3.



Grafiks 3.5.3. Pīķu kontrastainība atkarībā no Γ_p

No grafika 3.5.3. var secināt, ka pīķu kontrastainība strauji pieaug, pēc tam salīdzinoši lēni samazinās. Tas ir loģiski, izejot no apakšnodaļā 3.2 konstatētā fakta, ka, palielinoties Γ_p , lielākā apdzīvotības daļa sakrājas singleta līmenī n_g . No ierosinātā stāvokļa uz singleta stāvokli daļiņas relaksē daudz ātrāk, nekā no tā pamatstāvokļa, kas rada zināmo “pudeles kakla” efektu. Jo vairāk daļiņu paliek uz n_g līmeņa, jo mazāk to atrodas pamatstāvoklī, kā secinājums, daļiņu polarizācija izpaužas ne tik spilgti, kā tad, ja Γ_p būtu mazāka. No grafika 3.5.3. var noteikt visoptimālāko Γ_p diapazonu, kas atbilst pīķu lielākai kontrastainībai, lai labāk novērotu luminescences izmaiņas, tas ir apmēram no $0.12 \mu\text{s}^{-1}$ līdz $0.24 \mu\text{s}^{-1}$.

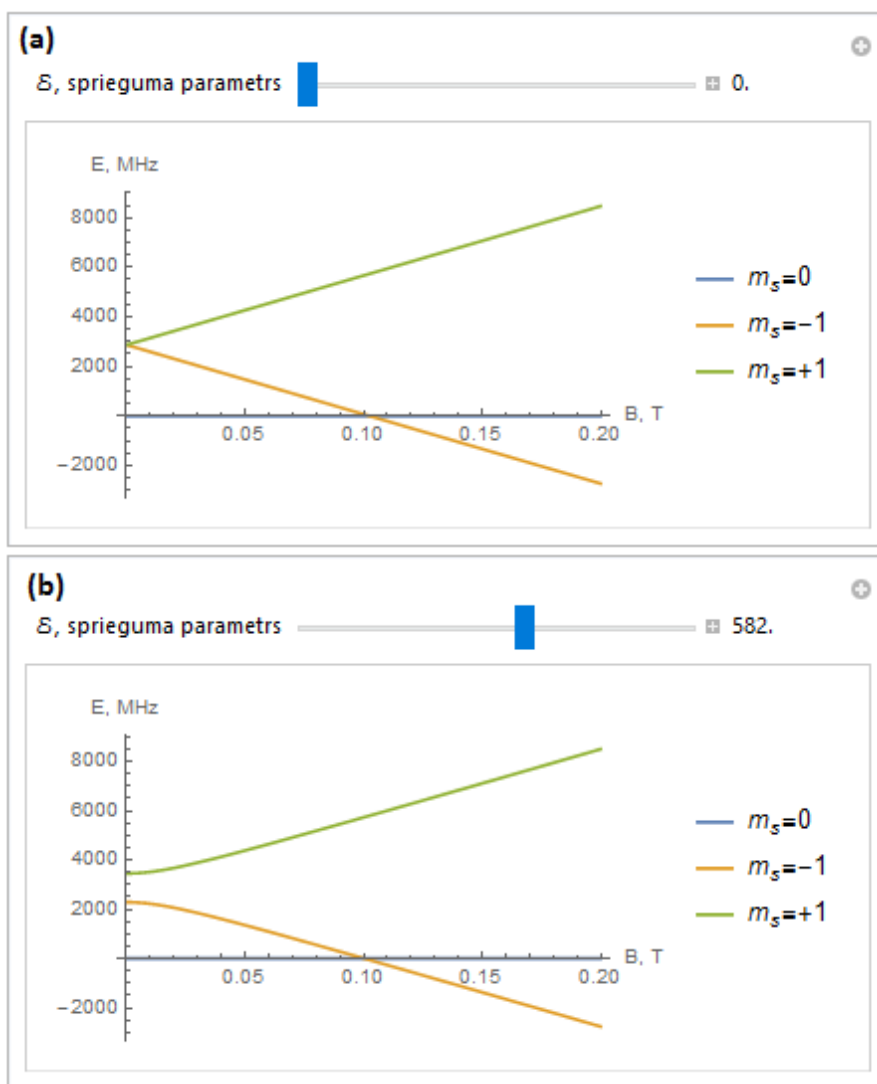
3.6 Iekšējā sprieguma ievērošana modelī

Līdz šim brīdim modeļa veidošanai īpašvērtības tika meklētas Hamiltoniānam (3.6), kurā sprieguma parametrs E nebija ievērots. Lai to ievērotu, Hamiltoniāns jāmodificē, ievadot tur locekli, kurš ir atbildīgs par sprieguma lauka klātbūtni:

$$\hat{H} = DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2) + g\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (3.9)$$

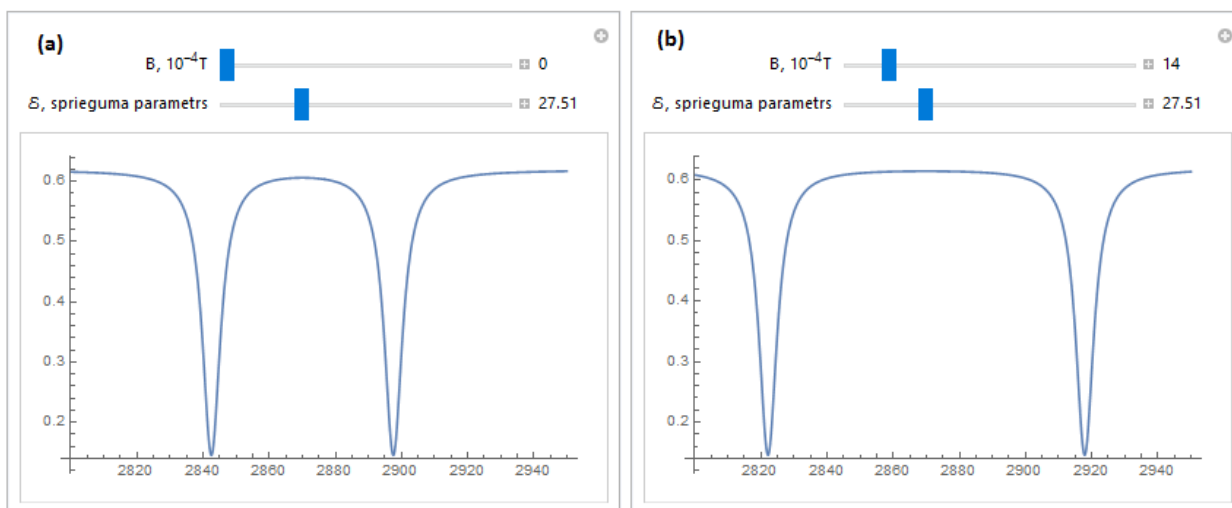
Jāatzīmē, ka parādās arī locekļi S_x un S_y , kuri apraksta spina komponentes, kuras nav vērsta NV centra ass virzienā.

Ilustrācijā 3.6.1. ir parādīts, kā sašķeļas pamatstāvokļa enerģētiskie apakšlīmeņi bez un ar sprieguma lauka klātbūtni.



Ilustrācija 3.6.1. Līmeņu sašķelšanās magnētiskajā laukā (a) bez iekšējā sprieguma, (b) ar nenulles sprieguma parametru E

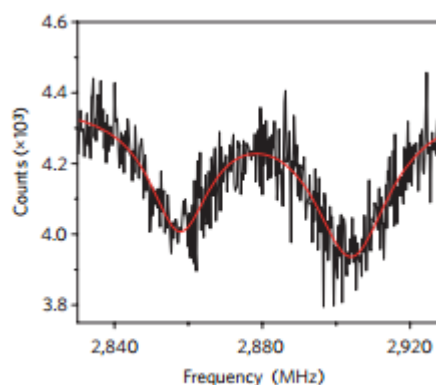
Kā redzams ilustrācijā 3.6.1., jau pie nulles magnētiskā lauka $m_s = \pm 1$ līmeņi nav deģenerēti, kas nozīmē, ka, mainot ārējo MW starojuma frekvenci pie $B = 0$, vajadzētu būt redzami 2 pīķi, respektīvi, līmeņu pārslāpšanās notikums divas reizes. Darba autora simulācijas rezultāti ir aplūkojami ilustrācijā 3.6.2.



Ilustrācija 3.6.2. ODMR simulācija nenulles sprieguma laukā (a) bez magnētiskā lauka klātbūtnes, (b) ar pielikto magnētisko lauku.

Tiešām, var redzēt, ka ir novērojami 2 pīķi $B = 0$ magnētiskajā laukā. To apstiprina arī publikācijā [31] aprakstītie eksperimenta laikā iegūtie dati (ilustrācija 3.6.3.).

Tālāk šī koncepcija netika attīstīta, jo tas ir ārpus darba uzdevumu aplūkotajiem jautājumiem. Tomēr tas varētu kalpot par labu starta punktu tālākajiem pētījumiem, jo NV centri var būt lietoti kristālā iekšējo spriegumu mērīšanā, kā arī sprieguma pielikšana var būt alternatīvā metode, kā kontrolēt un polarizēt NV centru spinus [32].



Ilustrācija 3.6.3. ODMR spektrs pie $B = 0$, kurā ir redzami divi pīķi, kuri atbilst $m_s = \pm 1$ līmeņiem, kuri liecina par sprieguma klātbūtni kristālā [31].

4. SECINĀJUMI

Tika panākti (iegūti) šādi rezultāti:

- Tika izstrādāts modelis NV krāsu centru mijiedarbībai ar magnētisko un mikroviļņu laukiem.
- Modelis tika aprakstīts ar lineāro vienādojumu sistēmu, kura tika pārbaudīta, variējot šajā sistēmā ienākošos parametrus.
- Vienādojuma risināšanai tika izveidota attiecīga programma *Mathematica* paketē.
- Tika veikti aprēķini enerģētisko līmeņu sašķelšanai magnētiskajā laukā, modelī bija ieviestas korekcijas, lai ņemtu vērā ārējo magnētisko un mikroviļņu laukus.
- Bija pārbaudīta modeļa atbilstība literatūrā atrastajiem eksperimentiem [22].
- Tika piedāvātas maināmā parametra optimālās vērtības, ar kurām var visefektīvāk manipulēt NV centru spinus. Apakšnodaļā 3.1. tika aprakstīta maināmā parametra Γ_p vērtība, ar kuru var panākt maksimālo pamatstāvokļa līmeņa ar $m_s = 0$ apdzīvotību: Γ_p diapazons ir apmēram no $\Gamma_p = 0.14 \mu s^{-1}$ līdz $\Gamma_p = 0.19 \mu s^{-1}$. Apakšnodaļā 3.3. tas pats parametrs bija novērtēts no maksimālās polarizācijas pakāpes sasniegšanas viedokļa, un tas bija $\Gamma_p > 0.95 \mu s^{-1}$, jo jau pie $\Gamma_p = 0.95 \mu s^{-1}$ polarizācija sasniedza 99% no maksimālās vērtības. Visbeidzot, apakšnodaļā 3.5. bija piemeklēta tāda Γ_p vērtība, pie kuras ODMR redzamie pīķi būtu vislabāk izšķirami, un tas ir diapazons no $\Gamma_p = 0.12 \mu s^{-1}$ līdz $\Gamma_p = 0.24 \mu s^{-1}$. Izrādās, ka visas šīs iegūtās vērtības ir tuvas, un diapazons no $\Gamma_p = 0.12 \mu s^{-1}$ līdz $\Gamma_p = 0.14 \mu s^{-1}$ atbilst visiem trijiem augšupminētajiem nosacījumiem. Darba turpinājumā Γ_p vērtība ir jāsaista ar ierosinošā lāzera intensitāti, jo tieši lāzera starojuma intensitāte ir tas lielums, ko maina eksperimentators.

Papildus potenciālais virziens darba attīstībai ir izpētīt iekšējo spriegumu ietekmi uz ODMR spektriem (plašākais problēmas apraksts ir iekļauts 3.6. apakšnodaļā).

5. Pateicības

Pateicība darba vadītājam Mārcim Auziņam par interesantās tēmas piedāvājumu, veltīto laiku, vērtīgām norādēm un pozitīvo, iedvesmojošo attieksmi.

Autors pateicas Dmitrijam Bočarovam, kurš sniedza morālo atbalstu un cītīgi pārbaudīja to, ko rakstīja darba autors.

Arī autors pateicas Mihailam Birjukovam, kura vēlme palīdzēt ir apbrīnojama.

6. IZMANTOTĀ LITERATŪRA UN AVOTI

- [1] **Marcus W. Dohertya, Neil B. Mansonb, Paul Delaneyc, Fedor Jelezko, Jörg Wrachtrupe, Lloyd C.L. Hollenberg**, "The nitrogen-vacancy colour centre in diamond", *Physics Reports*, vol. 10, p. 610-614, 2008
- [2] **G. Balasubramanian, I.Y.Chan, R.Kolesov, M.Al-Hmoud, J.Tisler, C.Shin, C.Kim, A.Wojcik, P.R.Hemmer, A.Krueger, T.Hanke, A.Leitenstorfer, R.Bratschitsch, F.Jelezko and J.Wrachtrup**, "Nanoscale imaging magnetometry with diamond spins under ambient conditions", *Nature*, vol. 455, p. 648-651, 2008
- [3] **F. Dolde, H. Fedder, M.W. Doherty, T. Nöbauer, F. Rempp, G. Balasubramanian, T. Wolf, F. Reinhard, L.C.L. Hollenberg, F. Jelezko, J. Wrachtrup**, "Nanoscale Detection of a Single Fundamental Charge in Ambient Conditions Using the NV⁻ Center in Diamond", *Physical Review Letters*, vol. 112, 097603, 2014
- [4] **X.-D. Chen, C.-H. Dong, F.-W. Suna, C.-L. Zou, J.-M. Cui, Z.-F. Han, and G.-C. Guo**, "Temperature dependent energy level shifts of nitrogen-vacancy centers in diamond", *Applied Physics Letters*, vol. 99, 161903, 2011
- [5] **L. P. McGuinness, Y. Yan, A. Stacey, D. A. Simpson, L. T. Hall, D. Maclaurin, S. Prawer, P. Mulvaney, J. Wrachtrup, F. Caruso, R. E. Scholten, L. C. L. Hollenberg**, "Quantum measurement and orientation tracking of fluorescent nanodiamonds inside living cells", *Nature Nanotechnology*, vol. 6, p. 358–363, 2011.
- [6] **L. Childress, M. V. Gurudev Dutt, J. M. Taylor, A. S. Zibrov, F. Jelezko, J. Wrachtrup, P. R. Hemmer, M. D. Lukin**, "Coherent Dynamics of Coupled Electron and Nuclear Spin Qubits in Diamond", *Science*, vol. 314, p. 281-285, 2006.
- [7] Wolfram Alpha website: <https://www.wolfram.com/>
- [8] **Francis S. Galasso, N. Kurti and R. Smoluchowski**. *Structure and Properties of Inorganic Solids*, Pergamon Press, 1-st ed., 1970. 308 p
- [9] **Р. Рипан, И. Четяну**. *Неорганическая химия Том 1*. Пер. с рум., под ред. академика В. И. Спицына и канд. хим. наук И. Д. Колли. Мир, 1971. 560 с.
- [10] **W. Kaiser and W. L. Bond**, "Nitrogen, A Major Impurity in Common Type I Diamond", *Physical Review*, vol. 115, p. 857, 1959

- [11] **Cox, M. E. Newton and J. M. Baker**, “ ^{13}C , ^{14}N and ^{15}N ENDOR measurements on the single substitutional nitrogen centre (P1) in diamond”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 6, p. 551-563, 1994
- [12] **Gordon Davies, Simon C. Lawson, Alan T. Collins, Alison Mainwood, and Sarah J. Sharp**, “Vacancy-related centers in diamond”, *Physical Review B*, vol. 46, 13157, 1992
- [13] **F. Jelezko and J. Wrachtrup**, “Single defect centres in diamond: A review”, *Physica Status Solidi (A) Applications and Materials Science*, vol. 13, p. 3207-3205., 2006
- [14] **Adam Gali, Maria Fyta, and Efthimios Kaxiras**, “Ab initio supercell calculations on nitrogen-vacancy center in diamond: Electronic structure and hyperfine tensors”, *Physical Review B*, vol. 77, 155206, 2006
- [15] **Takahiro Fukui, Yuki Doi, Takehide Miyazaki, Yoshiyuki Miyamoto, Hiromitsu Kato, Tsubasa Matsumoto, Toshiharu Makino, Satoshi Yamasaki, Ryusuke Morimoto, Norio Tokuda, Mutsuko Hatano, Yuki Sakagawa, Hiroki Morishita, Toshiyuki Tashima, Shinji Miwa, Yoshishige Suzuki and Norikazu Mizuochi**, “Perfect selective alignment of nitrogen-vacancy centers in diamond”, *Applied Physics Express*, vol. 7, 055201, 2014
- [16] **G. D. Fuchs, V. V. Dobrovitski, R. Hanson, A. Batra, C. D. Weis, T. Schenkel, and D. D. Awschalom**, “Excited-State Spectroscopy Using Single Spin Manipulation in Diamond”, *Physical Review Letters*, vol. 101, p. 8808-8815, 2008
- [17] **L. J. Rogers, M. W. Doherty, M. S. J. Barson, S. Onoda, T. Ohshima and N. B. Manson**, “Singlet levels of the NV^- centre in diamond”, *New Journal of Physics*, vol. 17, 013048, 2015
- [18] NV center associated projects, Quantum Bit Resources – The Nitrogen Vacancy Center in Diamond: <http://www.fysik.dtu.dk/english/research/qpit/research-at-qpit/engineered-solid-state-quantum-systems/nv-center-associated-projects>
- [19] **L. Rondin, J-P. Tetienne, T. Hingant, J-F. Roch, P. Maletinsky and V. Jacques**, "Magnetometry with nitrogen-vacancy defects in diamond", *Reports on Progress in Physics*, vol. 77, 056503, 2014
- [20] **Gruber, A. Drabenstedt, C. Tietz, L. Fleury, J. Wrachtrup, C. von Borczyskowski**, "Scanning Confocal Optical Microscopy and Magnetic Resonance on Single Defect Centers", *Science*, vol. 276, p. 2012-2014, 1997

- [21] **J. R. Maze, P. L. Stanwix, J. S. Hodges, S. Hong, J. M. Taylor, P. Cappellaro, L. Jiang, M. V. Gurudev Dutt, E. Togan, A. S. Zibrov, A. Yacoby, R. L. Walsworth, & M. D. Lukin**, "Nanoscale magnetic sensing with an individual electronic spin in diamond", *Nature*, vol. 455, p. 644-647, 2008
- [22] **Gopalakrishnan Balasubramanian, I. Y. Chan, Roman Kolesov, Mohannad Al-Hmoud, Julia Tisler, Chang Shin, Changdong Kim, Aleksander Wojcik, Philip R. Hemmer, Anke Krueger, Tobias Hanke, Alfred Leitenstorfer, Rudolf Bratschitsch, Fedor Jelezko & Jörg Wrachtrup**, "Nanoscale imaging magnetometry with diamond spins under ambient conditions", *Nature*, vol. 455, p. 648-651, 2008.
- [23] **L. Robledo, H. Bernien, T. van der Sar, and R. Hanson**, "Spin dynamics in the optical cycle of single nitrogen-vacancy centres in diamond." *New Journal of Physics*, vol. 13, 025013, 2011
- [24] **Carbonera D.**, "Optically detected magnetic resonance (ODMR) of photoexcited triplet states", *Photosynthesis Research*, vol. 102, p. 403-414, 2009
- [25] **Lloyd Hollenberg**, "Nanoscale MRI: Dark spins in the spotlight", *Nature Nanotechnology*, vol. 9, p. 253-255, 2014
- [26] **V. M. Acosta, E. Bauch, M. P. Ledbetter, C. Santori, K.-M. C. Fu, P. E. Barclay, R. G. Beausoleil, H. Linget, J. F. Roch, F. Treussart, S. Chemerisov, W. Gawlik, and D. Budker**, "Diamonds with a high density of nitrogen-vacancy centers for magnetometry applications", *Physical Review B*, vol. 80, 115202, 2009
- [27] **M. W. Doherty, F. Dolde, H. Fedder, F. Jelezko, J. Wrachtrup, N. B. Manson, and L. C. L. Hollenberg**, "Theory of the ground-state spin of the NV⁻ center in diamond", *Physical Review B*, vol. 85, 205203, 2012
- [28] **Viva R. Horowitz, Benjamín J. Alemán, David J. Christle, Andrew N. Cleland, and David D. Awschalom**, "Electron spin resonance of nitrogen-vacancy centers in optically trapped nanodiamonds", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 109, p. 13493–13497, 2012
- [29] **Y. Dumeige, M. Chipaux, V. Jacques, F. Treussart, J.-F. Roch, T. Debuisschert, V. M. Acosta, A. Jarmola, K. Jensen, P. Kehayias, and D. Budker**, "Magnetometry with nitrogen-vacancy ensembles in diamond based on infrared absorption in a doubly resonant optical cavity", *Physical Review B*, vol. 87, 155202, 2013
- [30] **J-P. Tetienne, L. Rondin, P. Spinicelli, M. Chipaux, T. Debuisschert, J-F. Roch and V. Jacques**, "Magnetic-field-dependent photodynamics of single NV defects in

diamond: an application to qualitative all-optical magnetic imaging", *New Journal of Physics*, vol. 14, 103033, 2012

- [31] **Bradac, T. Gaebel, N. Naidoo, M. J. Sellars, J. Twamley, L. J. Brown, A. S. Barnard, T. Plakhotnik, A. V. Zvyagin and J. R. Rabeau**, "Observation and control of blinking nitrogenvacancy centres in discrete nanodiamonds", *Nature Nanotechnology*, vol. 5, p. 345-349, 2010
- [32] **E. R. MacQuarrie, T. A. Gosavi, A. M. Moehle, N. R. Jungwirth, S. A. Bhave, and G. D. Fuchs**, "Coherent control of a nitrogen-vacancy center spin ensemble with a diamond mechanical resonator", *Optica*, vol. 2, p. 233-238, 2015

7. PIELIKUMI

1. pielikums. *Mathematica* kods līmeņu apdzīvotības noteikšanai atkarībā no lāzera starojuma pumpēšanas Γ_p

```
Manipulate[
{answers =
LinearSolve[{{-2 W - p, W, W,  $\Gamma$ , 0, 0, 0,  $\gamma_0$ }, {W, -W - p, 0, 0,  $\Gamma$ , 0, 0,  $\gamma_1$ },
{W, 0, -W - p, 0, 0,  $\Gamma$ , 0,  $\gamma_1$ }, {p, 0, 0, - $\Gamma$  - s, 0, 0, 0, 0},
{0, p, 0, 0, - $\Gamma$  - f, 0, 0, 0}, {0, 0, p, 0, 0, - $\Gamma$  - f, 0, 0},
{0, 0, 0, s, f, f, -g, 0}, {0, 0, 0, 0, 0, 0, g, -2  $\gamma_1$  -  $\gamma_0$ },
{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1}}, {0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1}]];
{{{ $\rho_{00}^g$ }, { $\rho_{-1-1}^g$ }, { $\rho_{11}^g$ }, { $\rho_{00}^e$ }, { $\rho_{-1-1}^e$ }, { $\rho_{11}^e$ }, { $n^e$ }, { $n^g$ } "=" answers //MatrixForm,
{p, 0.769230769, " $\Gamma_p, \mu s^{-1}$ "}, 0, 1, 0.01, Appearance -> "Labeled"},
{{f, 53, " $\gamma_f, \mu s^{-1}$ "},
{s, 7.9, " $\gamma_s, \mu s^{-1}$ "},
{g, 1/0.001, " $\Gamma_g, \mu s^{-1}$ "},
{W, 1/2900, " $\Gamma_1, \mu s^{-1}$ "},
{ $\Gamma$ , 66, " $\Gamma, \mu s^{-1}$ "},
{ $\gamma_1$ , 0.7, " $\gamma_1, \mu s^{-1}$ "},
{ $\gamma_0$ , 1, " $\gamma_0, \mu s^{-1}$ "},
LabelStyle -> Directive[Black, Plain, 16]]
```

2. pielikums. *Mathematica* kods līmeņu enerģiju sadalījuma noteikšanai un vizualizēšanai magnētiskajā laukā

$$\Omega = B * 13996 * 2;$$

$$\mathcal{D} = 2870;$$

$$\beta = 0;$$

$$\phi = 0;$$

$$\mathcal{E} = 0;$$

$$\text{Msplit} = \text{Eigenvalues}[\{\{$$

$$\mathcal{D} + \Omega \cos[\beta], \frac{e^{-i\phi} \Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, \mathcal{E}, \left\{ \frac{e^{i\phi} \Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, 0, \frac{e^{-i\phi} \Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}} \right\}, \left\{ \mathcal{E}, \frac{e^{i\phi} \Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, \mathcal{D} - \Omega \cos[\beta] \right\}\};$$

$$\text{Plot}[\{\text{Msplit}[[1]], \text{Msplit}[[2]], \text{Msplit}[[3]]\}, \{B, 0, 0.5\}, \text{PlotLegends} \rightarrow \{m_s = 0, m_s = -1, m_s = +1\}, \text{AxesLabel} \rightarrow \{B, T, E, \text{MHz}\}]$$

3. pielikums. *Mathematica* kods līmeņu apdzīvotības noteikšanai magnētiskā un ārējā MW lauka klātbutnē

$$\Omega = B * 13996 * 2;$$

$$\mathcal{D} = 2870;$$

$$\beta = 0;$$

$$\phi = 0;$$

$$\mathcal{E} = 0;$$

Manipulate[

$$\text{Msplit} = \text{Eigenvalues} \left[\left\{ \left\{ \mathcal{D} + \Omega \cos[\beta], \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, 0 \right\}, \left\{ \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, 0, \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}} \right\}, \left\{ 0, \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, \mathcal{D} - \Omega \cos[\beta] \right\} \right\} \right];$$

answers =

$$\text{LinearSolve}[\{-2 W - \text{GammaM1} - p, W + \text{GammaM1}, W + \text{GammaM2}, \Gamma, 0, 0, 0, \gamma_0\}, \{W + \text{GammaM1}, -W - \text{GammaM1} - p, 0, 0, \Gamma, 0, 0, \gamma_1\},$$

$$\{W + \text{GammaM2}, 0, -W - \text{GammaM2} - p, 0, 0, \Gamma, 0, \gamma_1\}, \{p, 0, 0, -\Gamma - s, 0, 0, 0, 0\},$$

$$\{0, p, 0, 0, -\Gamma - f, 0, 0, 0\}, \{0, 0, p, 0, 0, -\Gamma - f, 0, 0\},$$

$$\{0, 0, 0, s, f, f, -g, 0\}, \{0, 0, 0, 0, 0, 0, g, -2 \gamma_1 - \gamma_0\},$$

$$\{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\}, \{0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\}];$$

$$\text{GammaM1} = 1^2 / (1^2 + (\text{Msplit}[[2]] - \text{Msplit}[[1]] - \Omega_{\text{MW}})^2);$$

$$\text{GammaM2} = 1^2 / (1^2 + (\text{Msplit}[[3]] - \text{Msplit}[[1]] - \Omega_{\text{MW}})^2);$$

Show[Plot

$$[(\text{answers}[[1]] - 1/2(\text{answers}[[2]] + \text{answers}[[3]])/$$

$$(\text{answers}[[1]] + \text{answers}[[2]] + \text{answers}[[3]]),$$

$$\{B, 0, 0.15\}, \text{PlotRange} \rightarrow \text{All}, \text{AxesLabel} \rightarrow \{"B, T", "Polarizacija"}];$$

$$\{\{\Omega_{\text{MW}}, 0, \omega_{\text{MW}}, \text{Mhz}\}, 0, 8000, 0.0001, \text{Appearance} \rightarrow \text{"Labeled"}\}$$

4. pielikums. *Mathematica* kods līmeņu apdzīvotības noteikšanai pie fiksētas ω_{MW} vērtības

$$\Omega = B * 13996 * 2;$$

$$\mathcal{D} = 2870;$$

$$\beta = 0;$$

$$\phi = 0;$$

$$\mathcal{E} = 0;$$

Manipulate[

$$\text{Msplit} = \text{Eigenvalues} \left[\left\{ \left\{ \mathcal{D} + \Omega \cos[\beta], \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, 0 \right\}, \left\{ \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, 0, \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}} \right\}, \left\{ 0, \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, \mathcal{D} - \Omega \cos[\beta] \right\} \right\} \right];$$

answers =

$$\text{LinearSolve}[\{\{-2 W - \text{GammaM1} - p, W + \text{GammaM1}, W + \text{GammaM2}, \Gamma, 0, 0, 0, \gamma_0\}, \{W + \text{GammaM1}, -W - \text{GammaM1} - p, 0, 0, \Gamma, 0, 0, \gamma_1\},$$

$$\{W + \text{GammaM2}, 0, -W - \text{GammaM2} - p, 0, 0, \Gamma, 0, \gamma_1\}, \{p, 0, 0, -\Gamma - s, 0, 0, 0, 0\},$$

$$\{0, p, 0, 0, -\Gamma - f, 0, 0, 0\}, \{0, 0, p, 0, 0, -\Gamma - f, 0, 0\},$$

$$\{0, 0, 0, s, f, f, -g, 0\}, \{0, 0, 0, 0, 0, 0, g, -2 \gamma_1 - \gamma_0\},$$

$$\{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\}, \{0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\}];$$

$$\text{GammaM1} = 1^2 / (1^2 + (\text{Msplit}[[2]] - \text{Msplit}[[1]] - \Omega_{MW})^2);$$

$$\text{GammaM2} = 1^2 / (1^2 + (\text{Msplit}[[3]] - \text{Msplit}[[1]] - \Omega_{MW})^2);$$

Show[Plot

$$[(\text{answers}[[1]] - 1/2(\text{answers}[[2]] + \text{answers}[[3]])/$$

$$(\text{answers}[[1]] + \text{answers}[[2]] + \text{answers}[[3]]),$$

$$\{B, 0, 15\}, \text{PlotRange} \rightarrow \text{All}, \text{AxesLabel} \rightarrow \{\text{"B, T"}, \text{"Polarizacija"}\}],$$

$$\{\{\Omega_{MW}, 0, \text{"}\omega_{MW}, \text{MHz"}\}, 0, 100, 0.1, \text{Appearance} \rightarrow \text{"Labeled"}\}]$$

5. pielikums. *Mathematica* kods līmeņu apdzīvotības noteikšanai pie fiksētas B vērtības

$$\Omega = B * 13996 * 2;$$

$$\mathcal{D} = 2870;$$

$$\beta = 0;$$

$$\phi = 0;$$

$$\mathcal{E} = 0;$$

Manipulate[

$$\text{Msplit} = \text{Eigenvalues} \left[\left\{ \left\{ \mathcal{D} + \Omega \cos[\beta], \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, 0 \right\}, \left\{ \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, 0, \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}} \right\}, \left\{ 0, \frac{\Omega \sin[\beta]}{\sqrt{2}}, \mathcal{D} - \Omega \cos[\beta] \right\} \right\} \right];$$

answers =

$$\text{LinearSolve}[\{\{-2 W - \text{GammaM1} - p, W + \text{GammaM1}, W + \text{GammaM2}, \Gamma, 0, 0, 0, \gamma_0\}, \{W + \text{GammaM1}, -W - \text{GammaM1} - p, 0, 0, \Gamma, 0, 0, \gamma_1\},$$

$$\{W + \text{GammaM2}, 0, -W - \text{GammaM2} - p, 0, 0, \Gamma, 0, \gamma_1\}, \{p, 0, 0, -\Gamma - s, 0, 0, 0, 0\},$$

$$\{0, p, 0, 0, -\Gamma - f, 0, 0, 0\}, \{0, 0, p, 0, 0, -\Gamma - f, 0, 0\},$$

$$\{0, 0, 0, s, f, f, -g, 0\}, \{0, 0, 0, 0, 0, 0, g, -2 \gamma_1 - \gamma_0\},$$

$$\{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\}, \{0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\}];$$

$$\text{GammaM1} = 1^2 / (1^2 + (\text{Msplit}[[2]] - \text{Msplit}[[1]] - \Omega_{MW})^2);$$

$$\text{GammaM2} = 1^2 / (1^2 + (\text{Msplit}[[3]] - \text{Msplit}[[1]] - \Omega_{MW})^2);$$

Show[Plot

$$[(\text{answers}[[1]] - 1/2(\text{answers}[[2]] + \text{answers}[[3]])/$$

$$(\text{answers}[[1]] + \text{answers}[[2]] + \text{answers}[[3]]),$$

$$\{\Omega_{MW}, 2500, 3200\}, \text{PlotRange} \rightarrow \text{All}, \text{AxesLabel} \rightarrow \{\omega_{MW}, \text{MHz}\}, \text{"Polarizacija"}];$$

$$\{\{B, 12, \text{"B, } 10^{-4} \text{T"}\}, 0, 100, 0.1, \text{Appearance} \rightarrow \text{"Labeled"}\}]$$

Bakalaura darbs “Krāsu centru spinu polarizācijas ar gaismu modelēšana dimantu kristālos” izstrādāts LU Fizikas un matemātikas fakultātē.

Ar savu parakstu apliecinu, ka pētījums veikts patstāvīgi, izmantoti tajā norādītie informācijas avoti un iesniegtā kopija atbilst izdrukai.

Autors: Marija Isupova

Rekomendēju/nerekomendēju darbu aizstāvēšanai

Vadītājs: LU FMF profesors Dr.habil.phys. Mārcis Auziņš _____

Recenzents: LU FMF profesors Dr. habil. phys. Uldis Rogulis _____

Darbs iesniegts fizikas nodaļā 01.06.2017

Dekāna pilnvarotā persona Dzintra Holsta _____

Darbs aizstāvēts bakalaura gala pārbaudījuma komisijas sēdē

Komisijas sekretā _____