

**NONLINEAR PHENOMENA  
IN COMPLEX SYSTEMS**

*Chaos, Fractals, Phase Transitions, Self-organization*

Minsk, Belarus

**May 16–19, 2017**

**XXIV International Seminar**



**SPIN-ELECTRON and  
SPIN-NUCLEAR CUBITS IN  
DIAMOND NV- CENTERS**

**Sergey Vladimirovich Smurov**

(Engineering Physics Institution, Serpukhov)

**Gennady Germanovich Volkov**

(Nuclear Physics Institution, Gatchina, Engineering Physics Institution,  
Serpukhov)

**Victor Anatoljevich Monich**

(Technical University, Nizhny Novgorod, Medical Academy Nizhny Novgorod)

## **АННОТАЦИЯ**

В статье обсуждаются спин-электронные и спин - ядерные квантовые структуры в NV центрах в алмазе и анализируется цикл контрольных экспериментов над квантовыми двух уровневыми системами в этих центрах, которые могут использоваться в виде кубитов для создания квантовых сетей и квантовых компьютеров.

It was discussed the spin-electron and spin-nuclear quantum structures and the net of the control experiments on quantum two-level systems in NV centers in diamond, which can be used as qubits to create quantum networks and quantum computers.

The wonderful peculiarities of the quantum measurements and the quantum entanglement open huge perspectives for practical usage of the quantum physics achievements in development of quantum networks, quantum computers and a scientific breakthrough in atomic biology and medicine.

in classical mechanics the pure state is represented as a point in the phase-space and in quantum mechanics this state is a vector (function) in the complex vector-space.

We can note that in quantum mechanics are introduced both the physiogeometric extension of the conception of the state (from a point-like particle to a multidimensional object) that is characterized by a vector (wave function) and also the complex numbers theory-related and the philosophy-related mathematical extension

# **ИССЛЕДОВАНИЕ ОСЦИЛЛЯЦИЙ РАБИ В КУБИТАХ КРИСТАЛЛА АЛМАЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЗЕЛЕНОГО ЛАЗЕРА**

## **RABI OSCILLATIONS ON DIAMOND QUBITS BY USING A GREEN LASER**



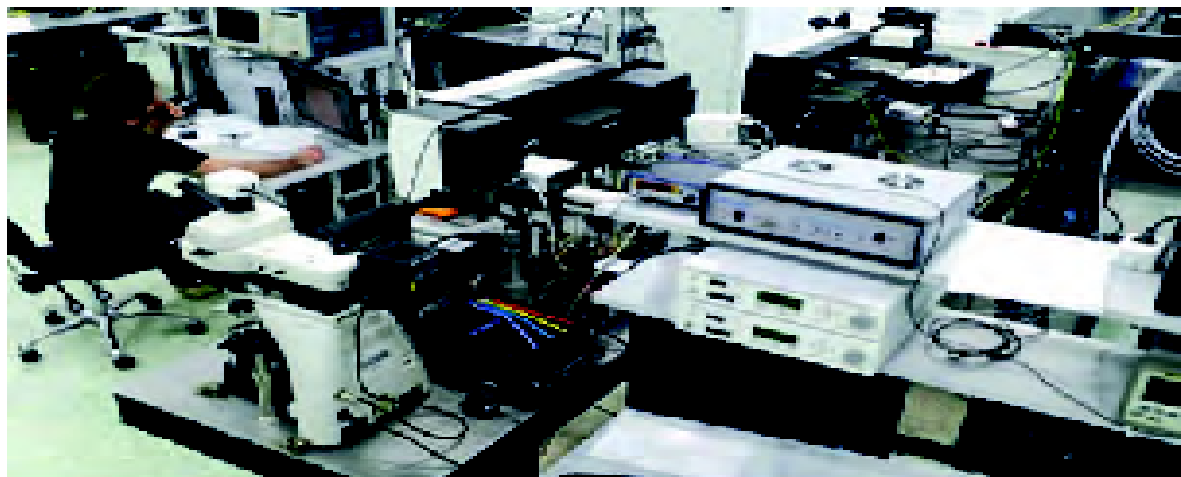
### **Аннотация**

В статье представлено описание разработанного и собранного экспериментального стенда для проведения исследований осцилляций Раби на ансамбле кубитов в NV-центрах кристалла алмаза. Представлены результаты измерений зависимости частоты осцилляций Раби от мощности электромагнитного поля в кристалле алмаза с использованием зеленого лазера для считывания квантового состояния.

**Ключевые слова:** квантовые системы, NV-центры в алмазе, осцилляции Раби, кубиты.

## Экспериментальная установка для исследования осцилляций Раби

Экспериментальная установка представлена на *рисунке 1*.



**Рис. 1.** Экспериментальная установка для исследования осцилляций Раби

В данных исследованиях использовался конфокальный микроскоп от компании Sol Instruments (Минск). Лазер 532 нм использовался для инициализации кубита в исходное состояние с проекцией спина  $m_z = 0$ . Этот же лазер возбуждал электрон NV-центра для регистрации состояния кубита с помощью метода ОДМР. Для требуемой последовательности импульсов лазера 532 нм использовался акусто-оптический модулятор.

Частота осцилляций Раби зависит от связи спина электрона с подаваемым СВЧ-полем. Качество этой связи зависит, прежде всего, от мощности СВЧ-поля, но и качество самого образца имеет значение. Посторонние примеси в алмазе и флуктуации полей решетки, очевидно, будут приводить к уменьшению частоты и увеличению затухания осцилляций Раби.

На *рисунках 3-6* представлены результаты измерения осцилляций Раби при частоте микроволнового поля 2,78 ГГц и разных мощностях усилителя этого микроволнового поля. Относительные величины мощностей указаны в подписях к рисункам. По экспериментальным точкам проведено фитирование функцией

$$p0 + p1 * \exp(p3 * x) * \cos(p2 * (x + p4)). \quad (1)$$

Параметры фильтра  $p0$ - $p4$  представлены на *рисунках 3-6*. Параметр  $p2$  соответствует частоте осцилляций Раби,  $p1$  показывает максимальный контраст ОДМР, по  $p3 = 1/T$  можно оценить время «затухания» осцилляций за счет декогеренции. Можно заметить, что декогеренция зависит от качества образца и находится в пределах  $500 \pm 100$  нс для всех мощностей сигнала СВЧ. Параметр  $p4$  учитывает неидеальность модулятора СВЧ-сигнала – видно, что минимальная длительность СВЧ-импульса, которая может быть получена на нашем оборудовании составляет бо-

Длительность сигнала управления зеленым лазером оптимизирована по максимуму интенсивности флуоресценции после инициализации кубита в состояние  $m_z = 0$ . Следует отметить, что длительности в 1-2 мкс, которая использовалась в работе [6], в данном случае было недостаточно, что указывает на низкую эффективность возбуждения лазером 532 нм нашего образца.

Измерения проводились при комнатной температуре. Однако, для более качественных результатов из двух состояний  $m_z = \pm 1$  при проведении измерений с помощью магнитного поля было выбрано только одно  $m_z = -1$ .

Можно заметить, что декогеренция зависит от качества образца и находится в пределах  $500 \pm 100$  нс для всех мощностей сигнала СВЧ. Параметр  $p4$  учитывает неидеальность модулятора СВЧ-сигнала – видно, что минимальная длительность СВЧ-импульса, которая может быть получена на нашем оборудовании, составляет более 8.5 нс. Поскольку длительность инвертирующего импульса ( $\pi$ -импульс), который и представляет практический интерес, много больше этого порога даже в случае 100% мощности СВЧ –  $T_\pi = 2\pi/0.053 = 118.5$  нс, – это ограничение не влияет на управление состоянием кубита.

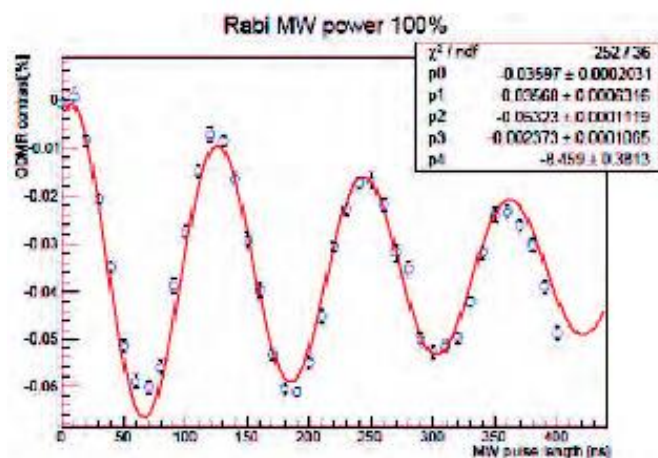


Рис. 3. Мощность генератора 100%

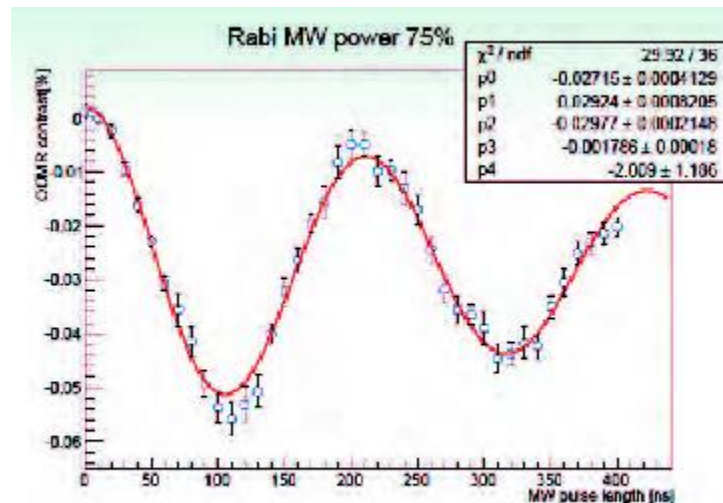


Рис. 4. Мощность генератора 75%

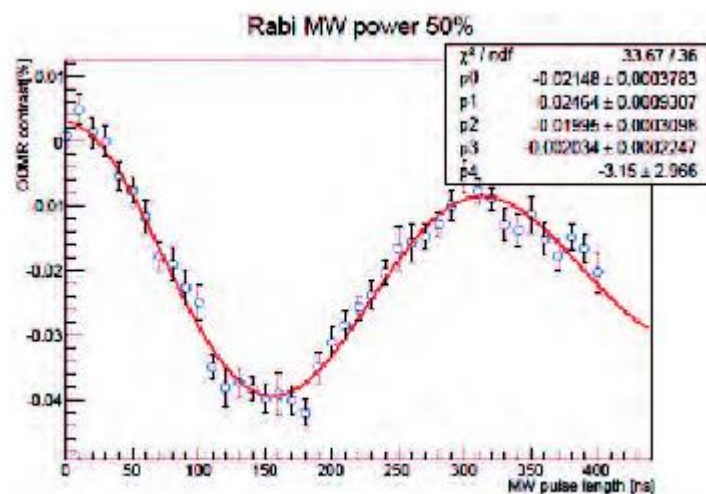
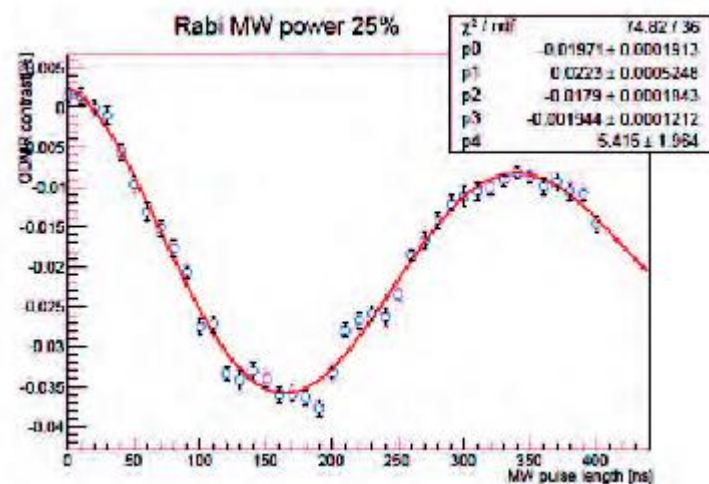


Рис. 5. Мощность генератора 50%





# THE ELECTRONIC STRUCTURE AND THE ENERGY SPECTRUM OF THE SIX-ELECTRON CENTER

The symmetries and their representations group theory method that could in accordance with the experimental data help to describe in the adiabatic approximation the energy levels and the symmetries of stationary states of electrons was used for creating the precise spectral model of the  $NV$  – centers (Fig1)

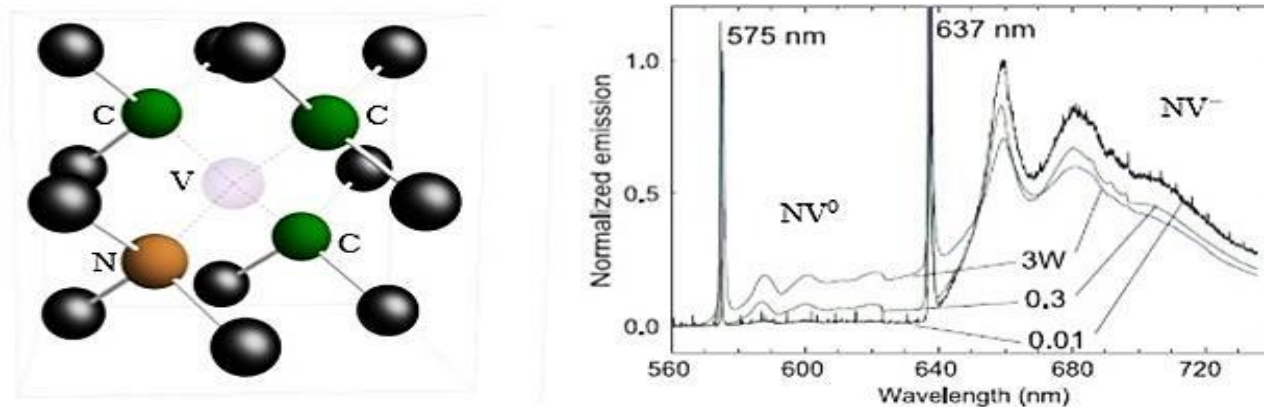


Fig. 1

The atomic structure of a nitrogen-vacancy center in a diamond ( $NV$ -center) and the corresponding specters of the neutral 5-electron center,  $NV(0)$  and the negatively charged 6-electrone center,  $NV(-)=NV$ , measured at the cryogenic temperature

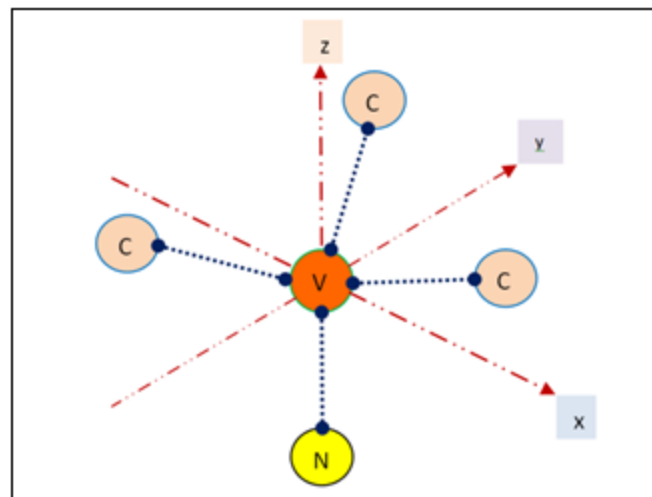
The electron system of the  $NV$  – center of a diamond contains six electrons: one electron each deliver three atoms of carbon,  $C^{12}$  (the atoms with the nuclear spin  $I=0$ ), two electrons are supplied by the nitrogen atom,  $N^{14}$  (the atom with the nuclear spin  $I=1$ ) and one electron is captured from the crystal medium of the diamond. As a result, the spin system of the  $NV$  – center includes spins of six electrons and spin of the nitrogen atom,  $N^{14}$ .

The electron-spin system of the  $NV$  – center was developed on the base of molecular models and the symmetries and the representations group theory. The crystal defect produced due to absence of one carbon atom and embedding into the diamond matrix instead of a neighboring one a nitrogen atom receives the point trigonal -symmetry formed by broken covalent bonds: three of the bonds with three carbon atoms and one with a nitrogen atom.

## От квантования атома водорода до теории атомарных и молекулярных орбиталей

С математической точки зрения при рассмотрении многоэлектронных атомов и многоатомных центров мы сталкиваемся с фундаментальной проблемой многих тел (трех и более), что приводит к огромным трудностям в нахождении решений соответствующего уравнения Шредингера для таких систем. Если при квантовании атома водорода были использованы только непрерывные группы и алгебры Ли, то в случае квантования многочастичных систем огромную роль играют дискретные конечные симметрии рассматриваемых систем относительно групп перестановок  $S_n$  или их подгрупп [11][12]. Более того, в стандартных случаях рассматриваемые конечные группы являются подгруппами непрерывных групп Ли. Например, группы вращения и отражения, являющиеся подгруппами группы  $SO(3)$ ,

В кубической ячейке решетки алмаза 8 атомов расположены в вершинах, 6 атомов – на ее гранях и 4 атома – в ее объеме. В алмазе каждый атом углерода расположен в центре тетраэдра, четыре вершины которого образованы соседними атомами углерода.



Для NV – алмазных центров мы имеем сложную атомарную систему, составленную из 3-х атомов углерода  $^{12}\text{C}$ , одного атома азота  $^{14(15)}\text{N}$ , вакансии

10

---

(C) и 5 – ти или 6 – ти электронов [4][13][14][15]. Как видно из рис.1, к вакансии обращены 4 – разорванные атомные связи  $\{\sigma_{C1}, \sigma_{C2}, \sigma_{C3}, \sigma_N\}$ .

которая используется при квантовании НВ – центра в алмазе. Эта группа некоммутативна и генерируется двумя групповыми элементами: вращение  $q$  и отражение  $r$  со следующими соотношениями:  $\{q^3 = r^2 = e, \underline{qr} = \underline{rq^2}\}$ , помимо этого, эта группа имеет три класса сопряжений:

$$\underline{C(I)} = \{R(I)\}, C_{2q} = \{R(q), R(q^2)\}, C_{3r} = \{R(r), R(\underline{rq}), R(\underline{rq^2})\} \quad (24)$$

и три неприводимых представлений. Два неприводимых представления одномерны, одно из них тождественное –  $A_1$ , а второе альтернативное –  $A_2$ . Третье же неприводимое представление –  $E$  является двумерным, причем, появление двумерного неприводимого представления является следствием некоммутативности этой группы. Приведем таблицу характеров для неприводимых представлений группы  $S_3 \cong \mathfrak{S}_3 \cong C_{3v}$ :

$$\left( \begin{array}{cc|ccc} \Gamma_i & C_i & I & C_{2q} & C_{3r} \\ A_1 & \chi_1 & 1 & 1 & 1 \\ A_2 & \chi_2 & 1 & 1 & -1 \\ E & \chi_3 & 2 & -1 & 0 \end{array} \right) \quad (25)$$

The electron orbitals,  $a_1' a_1, (e_x, e_y)$  (see Fig. 2) can be built in the crystal field of the defect in direct concordance with the reducible representation expansion  $\Gamma=(4,1,2)=2(1,1,1)+(2,-1,0)$  of the 4-th broken bonds into the irreducible representations of the group. Two of those orbitals,  $a_1' a_1$ , are completely symmetric, can be transformed by the one-dimensional irreducible representation,  $A_1=(1,1,1)$  and the double-reducible electronic orbital  $(e_x, e_y)$  is transformed according to the irreducible representation  $E=(2,-1,0)$ .

Six electrons from the unexcited ground-state, excited and doubly-excited negatively charged  $NV^-$  center occupy the three electric orbitals ( Fig. 2).

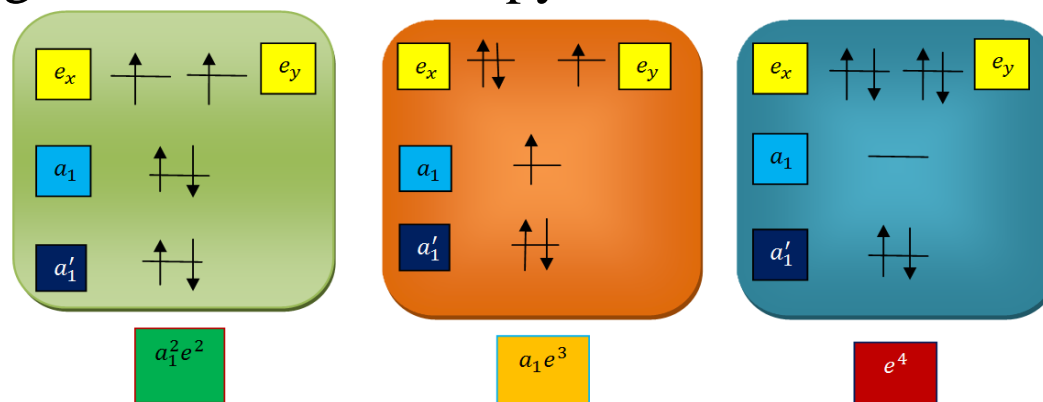


Fig. 2

The electron orbitals for the unexcited ground-state, the excited- and doubly-excited states

Для трех атомной углеродной подсистемы в алмазе, образующих геометрически правильный треугольник с группой симметрии  $C_{3v}$ , электронным орбиталям можно сопоставить приводимое представление  $\Gamma_s$ , которое в соответствии с характером  $\chi_s = \{\chi(I), \chi(C_{2q}), \chi(C_{3r})\} = \{3, 0, 1\}$  разлагается на неприводимые представления  $\Gamma_s = \Gamma_1 + \Gamma_3 = A_1 + E$ . В кубической кристаллической структуре чистого алмаза естественной группой является тетраэдральная группа  $T_d$ , имеющая порядок  $|T_d| = 24$ , структура которой содержит 5 классов сопряжения  $C_i$ . Соответственно, для такой группы можно построить 5 неприводимых представлений  $R_i$ , представленных в таблице характеров тетраэдрной группы  $T_d$ :

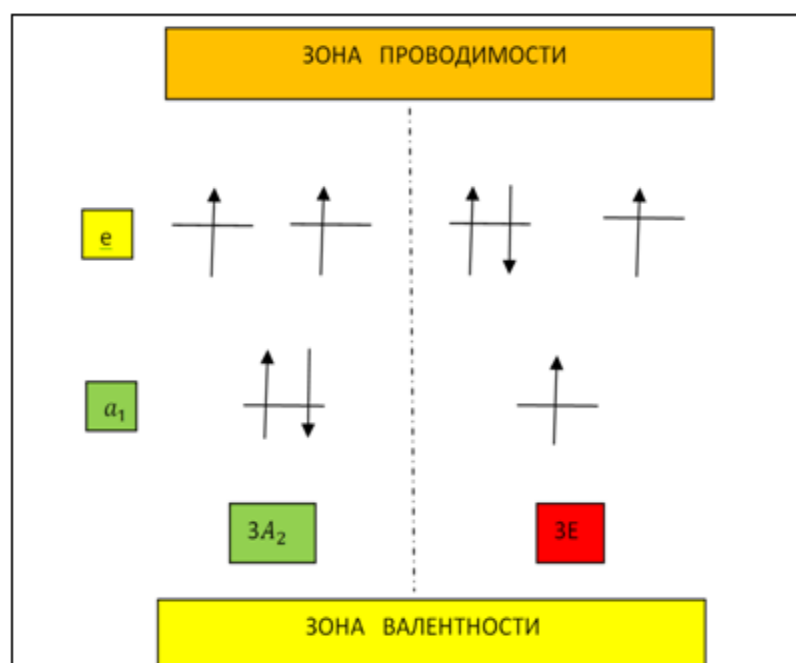
$$\left( \begin{array}{c|cccccc} \Gamma_i & C_i & C(I) & 3C_3 & 8C_2 & 6\sigma_d & 6S_4 \\ \hline A_1 & \chi_1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ A_2 & \chi_2 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ E & \chi_3 & 2 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ T_1 & \chi_4 & 3 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ T_2 & \chi_5 & 3 & -1 & 0 & 1 & -1 \end{array} \right) \quad (26)$$



$$a_{1(N)} = \chi_4, a_{1(C)} = \frac{\chi_1 + \chi_2 + \chi_3}{\sqrt{3}}, e_x = \frac{2\chi_1 - \chi_2 - \chi_3}{\sqrt{6}}, e_y = \frac{\chi_2 - \chi_3}{2}, \quad (29)$$

$$a'_1 = \alpha a_{1(N)} + \beta a_{1(C)}, \quad a_1 = \beta a_{1(N)} + \alpha a_{1(C)}, \quad (30)$$

которые соответствуют двум одномерным неприводимым представлениям и одному двумерному представлению группы  $C_{3v}$ .



Для решения таких сложных систем используется адиабатическое приближение, в котором все виды движения решетки, атомов и электронных облаков не зависят друг от друга, тогда полную волновую функцию Гамильтониана можно описать в виде произведения волновых функций, связанных с указанными видами движений [11][12]:

$$\Psi(total) = \Psi_e \times \Psi_{vibr} \times \Psi_{rot}. \quad (17)$$

При таком приближении полная энергия является простой суммой трех видов энергий (Кулоновские взаимодействия, колебательные и вращательные движения):

$$E_{total} = E_e + E_{vibr} + E_{rot}. \quad (18)$$

$$H_{NV} = \sum_{i=1}^6 \{T_i + V_{Ne}(\vec{r}_i, \vec{R}_0) + V_{SO}(\vec{r}_i, \vec{s}_i, \vec{R}_0)\} + \sum_{i>j} \{V_{ee}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + V_{ss}(\vec{s}_i, \vec{s}_j)\}. \quad (19)$$

В соответствии с тремя системами уровней энергии – электронной, колебательной и вращательной, энергетический спектр системы состоит из совокупности электронных, колебательных и вращательных спектров. В действительности, это разделение условное, так как часто электронные переходы могут сопровождаться изменением колебательной энергии системы, а при колебательных переходах изменяется и вращательная энергия. Электронные молекулярные спектры возникают при изменении электронной энергии молекул, если при этом не меняются колебательные и вращательные энергии. Они наблюдаются в поглощении (спектры поглощения), в испускании (спектры люминесценции) и в рассеянии (Раман).

$a_1^2 e^2$  THE GROUND STATE

$$S=1$$

$$|e_x e_y - e_y e_x\rangle \otimes \begin{cases} |\alpha\alpha\rangle \\ |\alpha\beta + \beta\alpha\rangle \\ |\beta\beta\rangle \end{cases} \left| A_2 \otimes (A_2 + E) = A_1 + E \rightarrow \|3A_2 \right.$$

$$S=0$$

$$\begin{cases} |e_x e_x - e_y e_y\rangle \\ |e_x e_y - e_y e_x\rangle \\ |e_x e_x - e_y e_y\rangle \end{cases} \otimes (|\alpha\beta\rangle - |\beta\alpha\rangle) \left| \begin{array}{l} E \otimes A_1 = E \\ A_1 \otimes A_1 = A_1 \end{array} \rightarrow \begin{array}{l} \|1E \\ \|1A_1 \end{array} \right.$$

$a_1 e^3$  , THE EXCITED STATE

$$S=1$$

$$|ae_x - e_x a\rangle \otimes \begin{cases} |\alpha\alpha\rangle \\ |\alpha\beta + \beta\alpha\rangle \\ |\beta\beta\rangle \end{cases} \left| E \otimes (A_2 + E) = E + A_1 + A_2 + E \rightarrow \|3E \right.$$

$$|ae_y - e_y a\rangle \otimes \begin{cases} |\alpha\alpha\rangle \\ |\alpha\beta + \beta\alpha\rangle \\ |\beta\beta\rangle \end{cases} |E \otimes (A_2 + E) = E + A_1 + A_2 + E \rightarrow \|3E$$

$$S = 0$$

$$\begin{array}{l} |ae_x + e_x a\rangle \otimes (|\alpha\beta\rangle - |\beta\alpha\rangle) \\ |ae_y + e_y a\rangle \otimes (|\alpha\beta\rangle - |\beta\alpha\rangle) \end{array} \Big| E \otimes A_1 = E \rightarrow \|1E$$

$e^4$  - DOUBLY- EXCITED STATE

$$S = 0$$

$$|\alpha\alpha\rangle \otimes (|\alpha\beta\rangle - |\beta\alpha\rangle) \| A_1 \otimes A_1 = A_1 \rightarrow \|1A_1$$

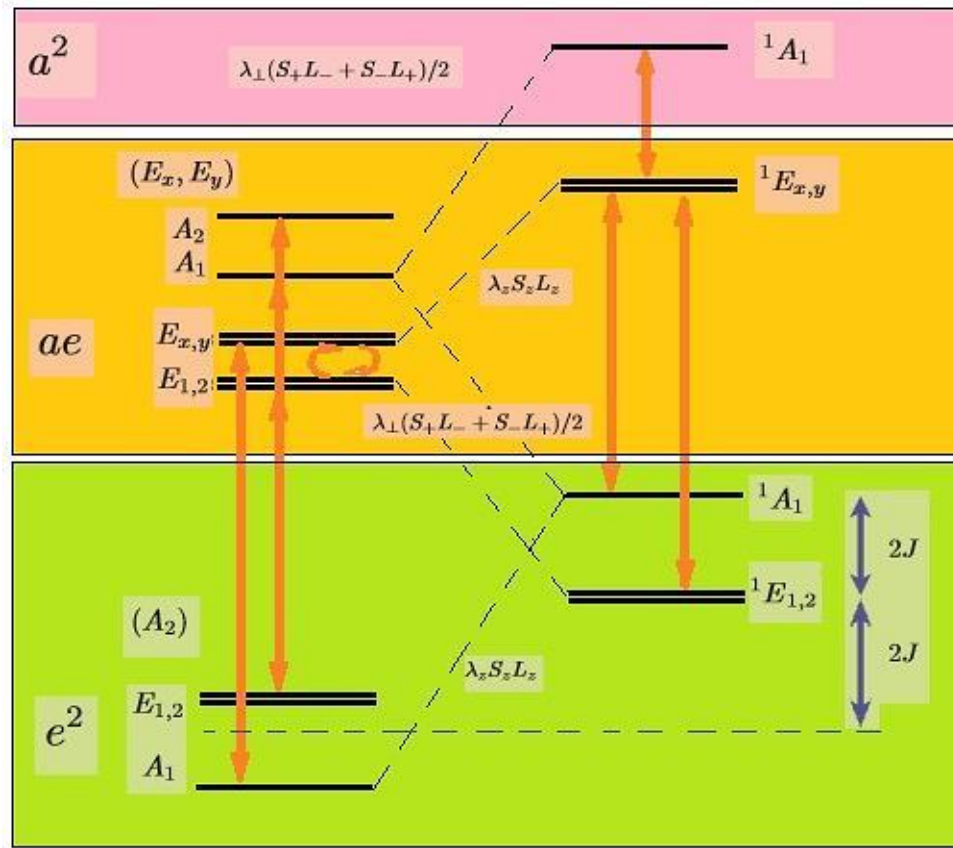


Fig. 3

The triplet-singlet (Maze) scheme of the NV-center electronic levels. Optical transitions (through dipole interaction) are shown by solid lines, nonradiative transitions (through the intermediate singlet states) are shown by dashed lines (Maze et al.)

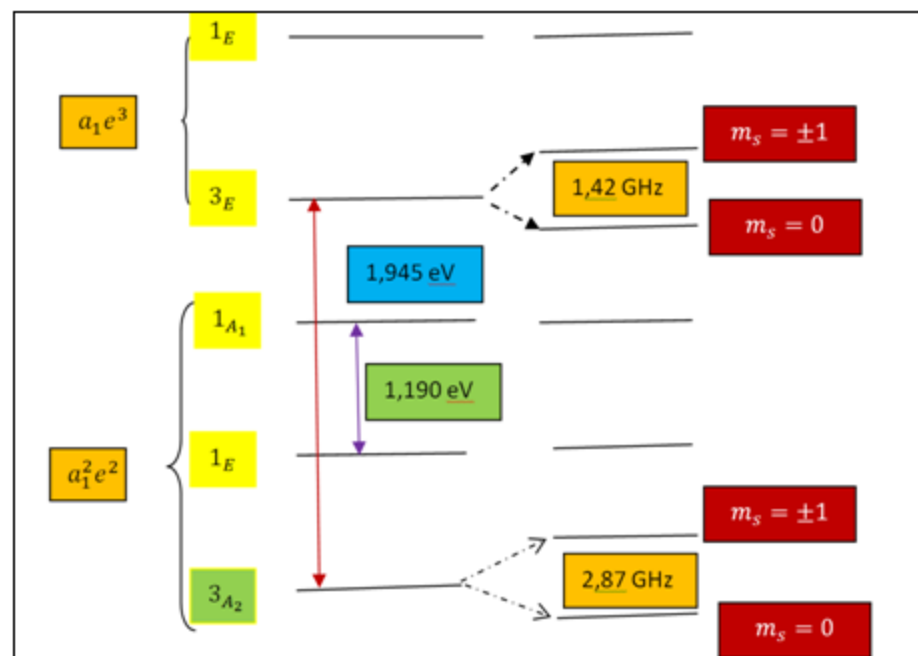


Рисунок 3. – Электронные орбитали основного  $a_1^2 e^2$  и возбужденных  $a_1 e^3$  состояний

Рисунок 3. – Электронные орбитали основного  $a_1^2e^2$  и возбужденных  $a_1e^3$  состояний

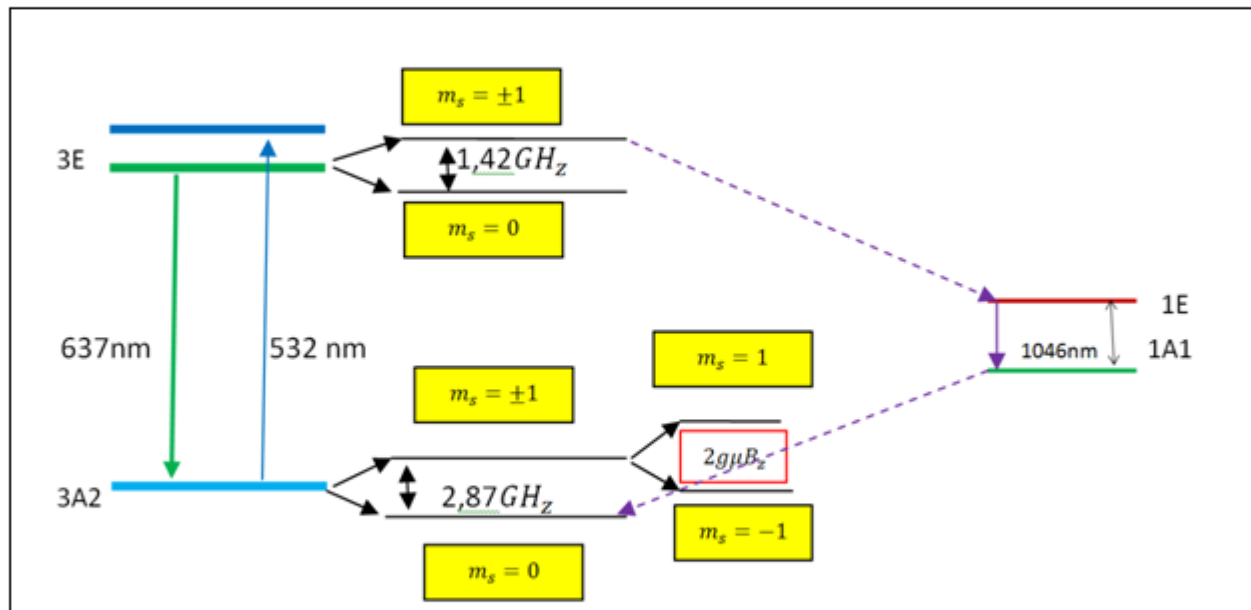


Рисунок 4. – Энергетические уровни НВ – центра (радиационные переходы указаны сплошными стрелками, а нерadiационные переходы – пунктирными стрелками)



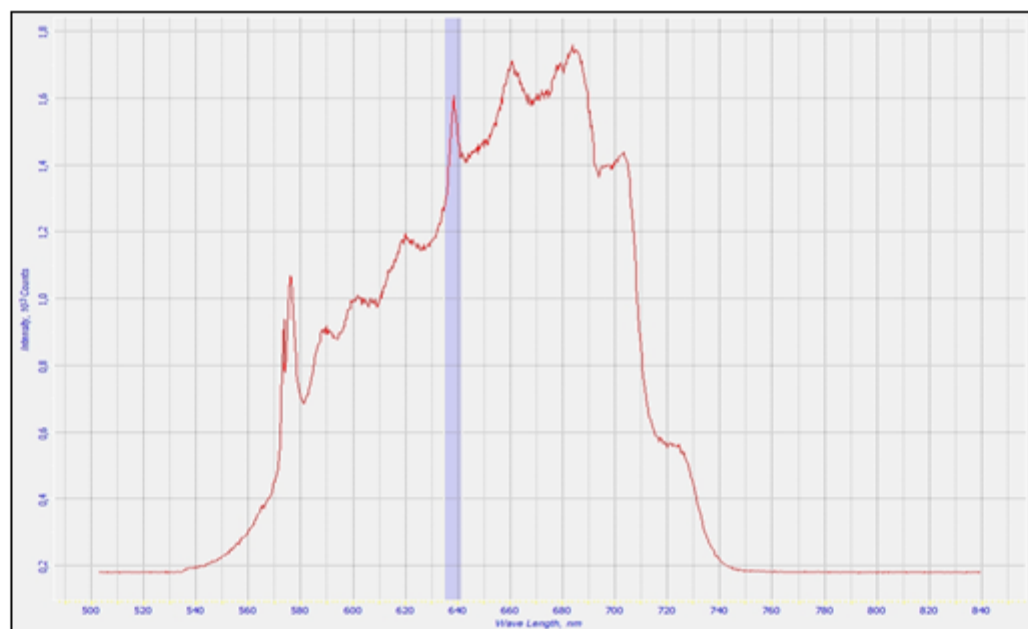


Рисунок 4. – Спектр флуоресценции в алмазе с большим числом NV-центров. Наблюдаются узкий высокий пик Рамана и маленькие пики нуль – фононных линий для  $NV^0$  575нм(2,156 эВ) и  $NV^-$ -637нм (1,945 эВ) центров



Рисунок 5. – Спектр флуоресценции в алмазе с небольшим числом NV – центров. Наблюдаются узкий высокий пик Рамана и маленькие пики нуль – фонных линий для  $NV^0$  575нм (2,156эВ) и  $NV^-$  – 637нм (1,945эВ) центров

## Литература

1. Дирак П. Принципы квантовой механики. // Наука, Москва, 1979.
2. Brandt S., Dahmen H.D. The pictures book of quantummechanics.// Springer – Verlag, New – York, 2001.
3. Ladd T.D., Jeletzko F., Laflamme R., Nakamura Y., Monroe C., O'Brien J.L. Quantum computers. // Review, Nature 464, 45 – 53, 2010.
4. Doherty M.W., Manson N.B., Delaney P., Jeletzko F., Wrachtrup J., Hollenberg L.C.L. The nitrogen-vacancy colour centre in diamond. // Physics Reports 528, 1, 2013.
5. Gruber A., Dräbenstedt A., Tietz C., Fleury L., Wrachtrup J. Scanning confocal optical microscopy and magnetic resonance on single defect centers. // Science 276 (5321), 2012 – 2014.

6. Васильев А.Н., Смуров С.В., Семёнов П.А., Кукин Н.С., Бухтияров А.А., Капусткин Д.О. Экспериментальное наблюдение оптически детектируемого магнитного резонанса в кристалле алмаза с примесями азота. // Известия ИИФ, №2(40), 2016.

7. Fock V.A. Zur Theorie des Wassenstoffatoms. // Zs.Phys., 98, 145, 1935.

8. Bargmann V. Zur Theorie des Wassersoffatoms. // Zs.Phys., 99, 576, 1936.

9. Смуров С.В., Волков Г.Г., Глотова И.О., Кукин Н.С., Мурадова А.Р. Математические вопросы расширения основ квантовых теорий. // Известия ИИФ, №4(38)79, 2015.

10. Barut A.O., Kleinert H., Rumer Yu.B., Fet A.I. SO(4,2). // 1971.

11. Полонский Н.А. Точечные группы симметрии. // БГУ Минск, 2003.

12. Dresselhaus M.S. Applications of Group Theory to the Physics of Solids. // 8.510J&6.734J: Spring, 2002.

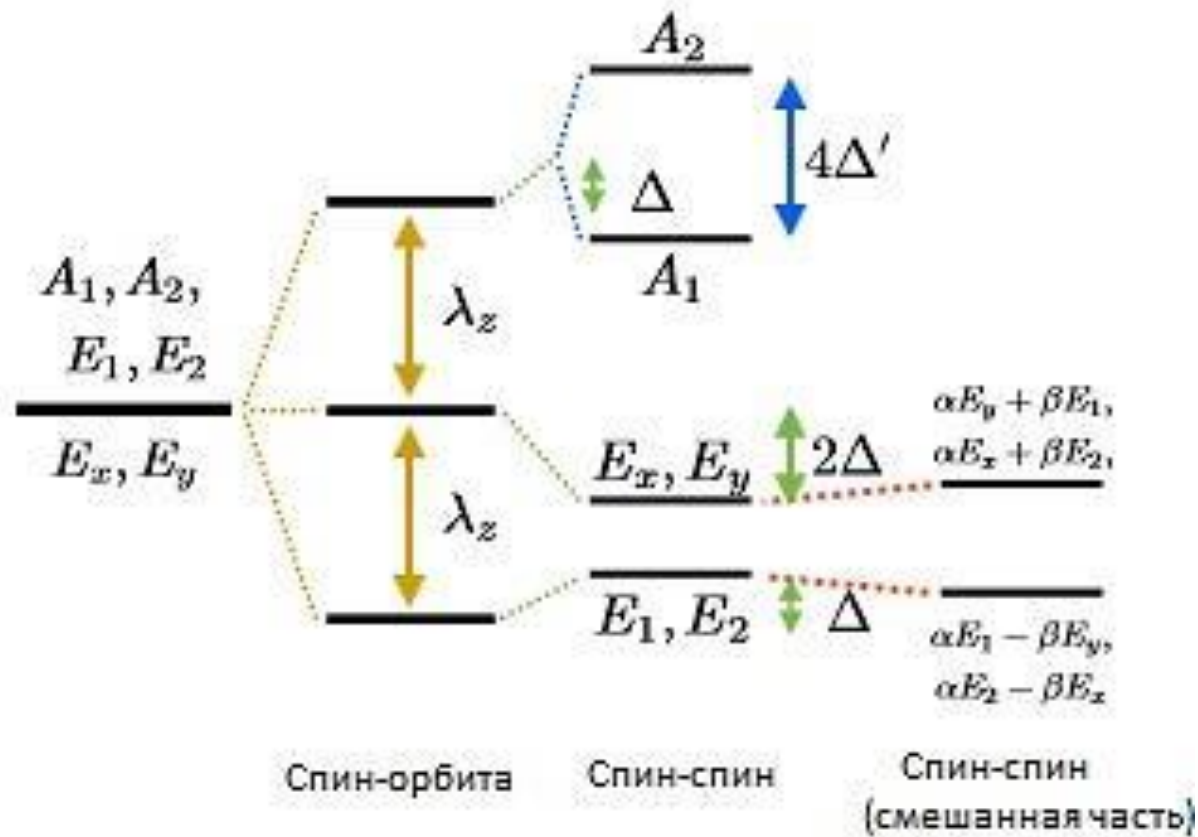


Fig. 4

The possible scheme of splitting of the excited triplet states (owing to the fine spin-orbital and hyperfine spin-spin interaction splitting

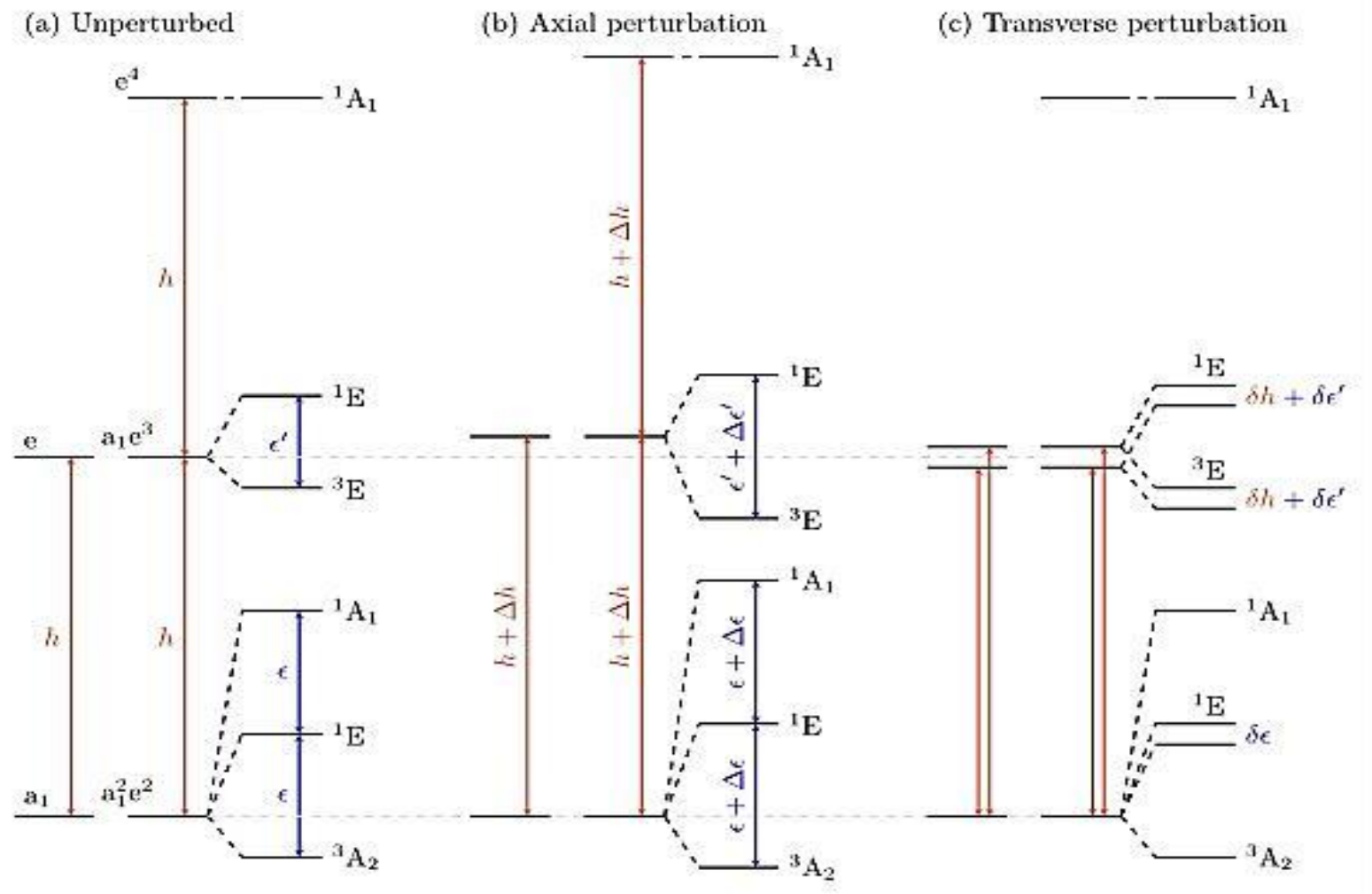


Fig. 5

The possible scheme of triplet states splitting  
(owing to the fine spin-orbital interaction, the axial and the transversal  
dynamic mechanisms of the lattice that are able to modify the status of the -  
symmetry of the NVcenter)

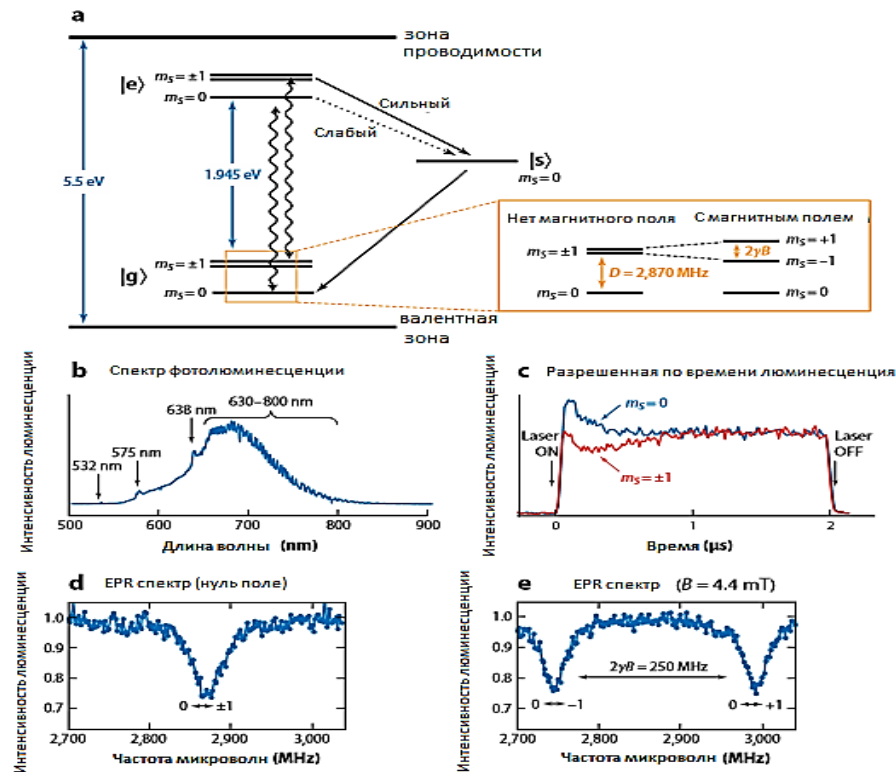


Fig. 6

a) the general scheme of the energy levels of the NV center, where the spin-spin,  $D=2,88$  MHz, and  $D=1,4$  MHz, triplet splitting into two,  $m_s=0$  and  $m_s=\pm 1$ , sublevels are shown for the ground,  $|g\rangle$ , and the excited,  $|e\rangle$ , states correspondingly. Energizing of magnetic field provides subsequent splitting of the levels from  $m_s=+1$  and  $m_s=-1$ . b) the normalized emissive spectrum of the assembly of the neutral, NV0, and the negatively charged, NV centers excited by 532 nm laser light at the room temperature. The zero phonon lines of these centers are at 575 nm and 837 nm correspondingly. c) example of time dependence of fluorescence for the pure origin states  $m_s=0$  and  $m_s=\pm 1$ . d) e) the NV spectroscopy provided without a magnetic field d) and with it e) if the magnetic field  $B = 0$ , the resonance frequency is 2.87 GHz). Energizing of magnetic field splits the states  $m_s=+1$  and  $m_s=-1$  according to the Zeeman effect and correspondingly their resonance frequency proportionally to the gap between the energy states

According to the context of the NV center spin-electron levels, the quantum systems based on the two energy splitted states with different spin properties are investigated. Energizing of static and oscillating magnetic fields enables to rotate spins and modify the spin states of the NV center. So, the static magnetic fields,  $B_z$ , parallel to the axis of NV quantization initiate free precession and are able to change the angle  $\varphi$  on the Bloch sphere. Perpendicular to the quantization axis ( $B_x, B_y$ ) oscillating magnetic fields can modify the population and change the  $\vartheta$  angle on the Bloch sphere:

$$|q\rangle = \cos \frac{\vartheta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} |1\rangle$$

-level quantum systems as the electron qubit of the NV center, where the following definitions for the ground state  $3A$  can be accepted:  $|g_0\rangle$  -level with  $m_s=0 \rightarrow |0\rangle$  and the double-degenerated  $|g_1\rangle$  level,  $m_s=\pm 1 \rightarrow |1\rangle$ . Consequently, the probability of the corresponding transition,  $|g_0\rangle \rightarrow |g_1\rangle$ , can be estimated.



$$P_{g_1} = \frac{\omega_{xy}^2}{\Delta\omega^2 + \omega_{xy}^2} \sin^2 \left( \frac{t \sqrt{\Delta\omega^2 + \omega_{xy}^2}}{2} \right), \Delta\omega = \omega - \omega_z, \operatorname{tg} \vartheta = - \frac{\omega_{xy}}{\Delta\omega}$$

where  $2 \cos(\omega t)$  are the leading microwave oscillations. At resonance on the Bloch sphere this operation corresponds to rotations of the qubit around the axis OX:

$$|q(t)\rangle = \cos \frac{\omega_{xy} t}{2} |g_0\rangle + i \sin \frac{\omega_{xy} t}{2} |g_1\rangle, \quad \Delta\omega = 0.$$

So, the rotation on the Bloch sphere  $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$  corresponds to the  $\pi$ -impulse ( $t=\pi$ ), and rotation on the equatorial plane (XOY) -  $\pi/2$  to the impulse ( $t=\pi/2$ ).

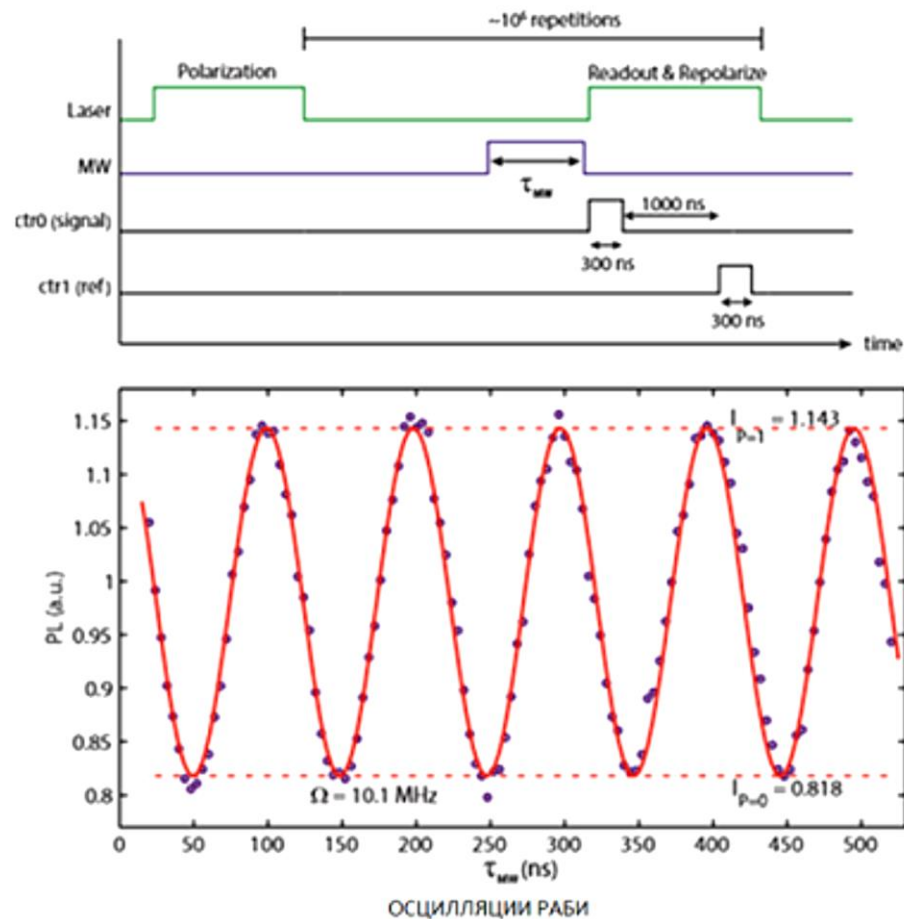


Fig. 7

The double-level quantum system control. The controllable Raby oscillations. The population of the double-level system  $|0\rangle \rightarrow |1\rangle \rightarrow |0\rangle \dots$  oscillates under the control of the  $\pi$  –impuls microwave field (the  $\Pi$ -impuls).

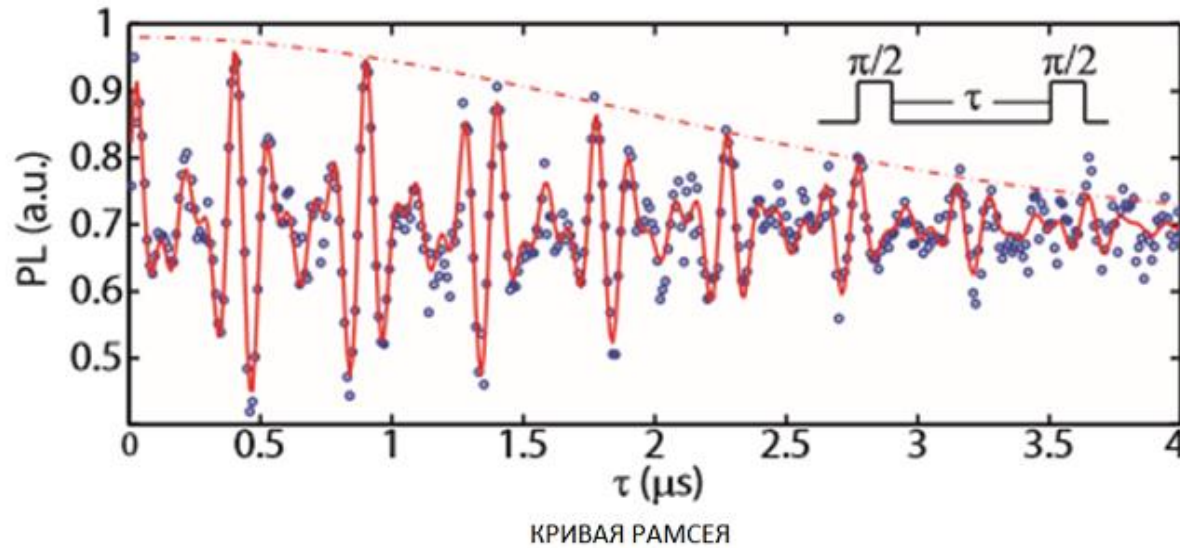


Fig. 8

The double-level quantum system control (T2\*).

The Ramsay fringes: (initialization)-> $\pi/2$ -> $\delta t$ (evolution)-> $\pi/2$ ->measurements

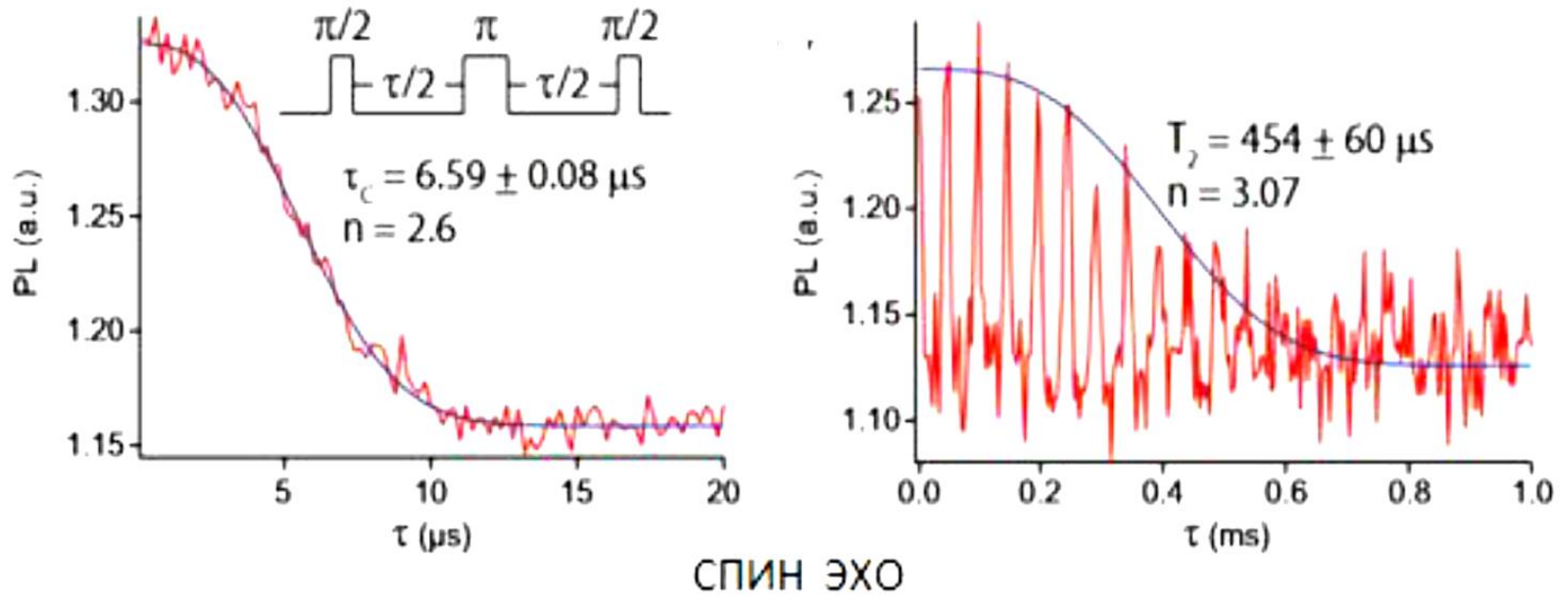


Fig. 9

The double-level quantum system control ( $T_2^*$ ).

The Ramsay fringes: (initialization)-> $\pi/2$ -> $\delta t$ (evolution)-> $\pi/2$ ->measurements

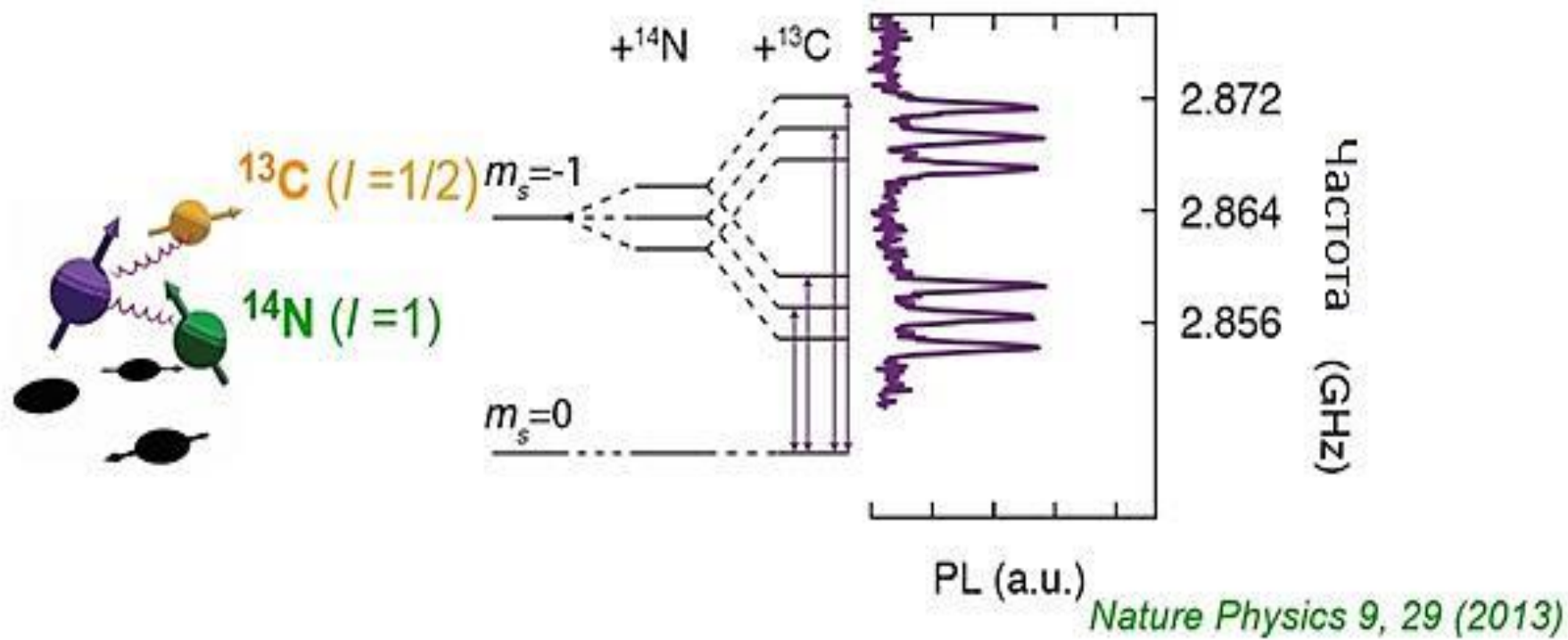


Fig. 10  
Spin energy-level diagrams for nitrogen and carbon atoms