



**LATVIJAS
UNIVERSITĀTE**

**Promocijas darba
kopsavilkums**

Laima Bušaite

**MAGNETO-OPTISKIE EFEKTI
RUBĪDIJA TVAIKOS UN
SLĀPEKĻA–VAKANCES CENTROS
DIMANTA KRISTĀLĀ**

Rīga, 2021



LATVIJAS UNIVERSITĀTE

FIZIKAS, MATEMĀTIKAS UN OPTOMETRIJAS FAKULTĀTE

Laima Bušaite

MAGNETO-OPTISKIE EFEKTI RUBĪDIJĀ TVAIKOS UN SLĀPEKĻA-VAKANCES CENTROS DIMANTA KRISTĀLĀ

PROMOCIJAS DARBA KOPSAVILKUMS

Doktora grāda iegūšanai fizikā

Apakšnozare: Lāzeru fizika un spektroskopija

Rīga, 2021

Promocijas darbs izstrādāts Latvijas Universitātes Fizikas, matemātikas un optometrijas fakultātes Lāzeru centrā laika posmā no 2012. līdz 2021. gadam.

Darbs sastāv no ievada, 6 nodaļām, nobeiguma, literatūras saraksta, 3 pielikumiem.

Darba forma: disertācija fizikas nozarē, lāzeru fizikas un spektroskopijas apakšnozarē.

Darba zinātniskais vadītājs: prof. Dr.habil.phys. Mārcis Auziņš, Fizikas, matemātikas un optometrijas fakultāte, Latvijas Universitāte.

Darba recenzenti:

1. prof. Dr.habil.phys. Andris Ozols, Rīgas Tehniskā universitāte, Latvija
2. Dr.phys. Andrejs Jarmola, Kalifornijas Universitāte, ASV
3. Dr. Aram Papoyan, Armēnijas Zinātņu akadēmijas Fizikālo pētījumu institūts, Armēnija

Promocijas darba aizstāvēšana notiks Latvijas Universitātes Fizikas zinātnes nozares promocijas padomes atklātā sēdē 2021. gada 17. decembrī, pulksten 15:00, LU Fizikas, matemātikas un optometrijas fakultātē, Jelgavas ielā 3, Rīgā.

Ar promocijas darbu un tā kopsavilkumu var iepazīties Latvijas Universitātes Bibliotēkā Rīgā, Kalpaka bulvārī 4.

LU fizikas specializētās promocijas padomes priekšsēdētājs:

Dr.habil.phys. Linards Skuja

padomes sekretāre:

Annija Stūrmane

© Latvijas Universitāte, 2021

© Laima Bušaite, 2021

ISBN 978-9934-18-739-1

ISBN 978-9934-18-740-7 (PDF)

Anotācija

Promocijas darbā tiek apskatīta teorētisko un skaitlisko modeļu, kas apraksta nelineāro magneto-optisko gaismas polarizācijas plaknes griešanu rubīdija tvaikos un supersikstruktūras līmeņu sajaukšanos un dinamisko kodola spina polarizāciju slāpekļa–vakances centros, izstrāde, adaptācija un pārbaude. Izstrādātie modeļi ir balstīti uz Liuvilla vienādojumiem kvantu sistēmām, pievienojot relaksāciju. Promocijas darba pirmā daļa apraksta gaismas polarizācijas plaknes griešanu, ierosinot rubīdija pārēju $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$. Šajā daļā tiek apskatīta daļēji izšķirtas supersikstruktūras, kā arī pamatstāvokļa repopulācijas, kas notiek caur starpstāvokļiem, ietekme uz rotācijas signāliem. Otrā promocijas darba daļa ietver modeļus, kas izveidoti, lai aprakstītu optiski detektējamās magnētiskās rezonanses signālus un dinamiskās kodola spina polarizācijas signālus slāpekļa–vakances centros dimanta kristālā. Šie modeļi tika izmantoti, lai analizētu tādu parametru ietekmi kā leņķis starp slāpekļa–vakances centra asi un ārējo magnētisko lauku, kristāla spriegums, relaksācijas ātrums un optiskās pumpēšanas ātrums, kas raksturo lāzera jaudu. Modelēto signālu analīze tika veikta, īpašu uzmanību pievēršot magnētiskā lauka stiprumam, kas atbilst slāpekļa–vakances centra pamatstāvokļa magnētisko apakšlīmeņu krustošanās vietām. Visu promocijas darbā izstrādāto modeļa testēšanai tika izmantoti eksperimentālie dati.

Saturs

| | |
|--|-----------|
| Saīsinājumu saraksts | 6 |
| 1 Ievads | 7 |
| 1.1 Promocijas darba mērķis un uzdevumi | 8 |
| 1.2 Publikācijas un autores ieguldījums | 9 |
| 1.2.1 Publikācijas, kas nav iekļautas promocijas darbā . . | 10 |
| 1.3 Konferences | 10 |
| 2 Nelineāra magneto-optiskā rotācija zilās gaismas ierosmei rubīdija tvaikos | 13 |
| 2.1 Liuvila vienādojums | 14 |
| 2.2 Atomārā sistēma | 16 |
| 2.3 Teorētiskais modelis | 17 |
| 2.4 Modeļa pielāgošana eksperimentālajiem apstākļiem | 18 |
| 2.5 Rezultāti | 22 |
| 2.5.1 Gaismas polarizācijas plaknes rotācijas spektrs . . . | 22 |
| 2.5.2 NMOR signālu atkarība no gaismas intensitātes . . . | 25 |
| 2.5.3 Stara diametra ietekme uz NMOR signāliem | 25 |
| 2.6 Secinājumi | 27 |
| 3 Optiski detektējamu magnētisko rezonanšu signālu mode- lēšana slāpekļa – vakances centros dimanta kristālā ārējā magnētiskā lauka klātbūtnē | 28 |
| 3.1 NV centra enerģijas līmeņu struktūra | 29 |
| 3.2 Pamatstāvokļa līmeņu antikrustošā supersīkstruktūras līmeņu sajaukšanās | 32 |
| 3.3 NV centru ODMR signālu modelēšana, iekļaujot supersīkstruk- tūru | 34 |
| 3.4 ODMR signālu modelēšana, ņemot vērā tuvumā esošos ^{13}C kodola spinus | 35 |
| 3.5 Eksperimentālie dati | 37 |
| 3.6 Rezultāti | 38 |
| 3.6.1 Modelētie ODMR signāli $ m_S = 0\rangle \rightarrow m_S = +1\rangle$ pāreju kopumam | 38 |
| 3.6.2 Modelētie ODMR signāli $ m_S = 0\rangle \rightarrow m_S = -1\rangle$ pāreju kopumam | 40 |
| 3.6.3 Modelēto signālu salīdzinājums ar eksperimentāli iz- mērītajiem signāliem | 42 |
| 3.6.4 ODMR signāli ar ^{13}C mijiedarbību | 45 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.7 | Secinājumi | 45 |
| 4 | Dinamiskā ^{14}N kodola spina polarizācija slāpekļa - vakanču centros dimanta kristālā | 47 |
| 4.1 | Lindblada vienādojumu modelis | 48 |
| 4.2 | Rezultāti | 50 |
| 4.2.1 | Kodola spina polarizācijas atkarība no magnētiskā lauka leņķa | 50 |
| 4.2.2 | Kodola spina polarizācijas atkarība no pārejas ātrumiem | 51 |
| 4.2.3 | Kodola spina polarizācijas atkarība no šķērseniskā deformācijas sprieguma | 52 |
| 4.2.4 | Kodola spina polarizācijas atkarība no optiskās pum-pēšanas ātruma | 54 |
| 4.2.5 | Modeļa pārbaude, salīdzinot ar eksperimentālajiem datiem | 54 |
| 4.3 | Secinājumi | 57 |
| 5 | Galvenie rezultāti | 59 |
| | Literatūras saraksts | 68 |

Saīsinājumu saraksts

| | |
|-------|--|
| ESLAC | ierosinātā stāvokļa līmeņu antikrustošānās (<i>Excited-State Level Anti-Crossing</i>) 47, 50, 51, 53, 55, 56 |
| GSLAC | pamatstāvokļa līmeņu antikrustošānās (<i>Ground-State Level Anti-Crossing</i>) 28, 32, 34, 39, 40, 43, 44, 47, 50, 53, 55–57 |
| NMOR | nelineāra magneto-optiskā gaismas polarizācijas plaknes rotācija 7, 8, 13, 18–20, 22, 23, 25, 26 |
| NV | slāpekļa–vakances centrs (<i>Nitrogen-Vacancy center</i>) 7–9, 12, 28–32, 35–45, 47–50, 52–59 |
| ODMR | optiski detektējama magnētiskā rezonanses (<i>Optically Detected Magnetic Resonance</i>) 7, 8, 28, 29, 35–45, 54–56 |
| Rb | rubīdijs 7, 16 |

1 Ievads

Šajā promocijas darbā tiek pētīti magneto-optiskie efekti divu veida vidēs – rubīdija (Rb) tvaikos un slāpekļa–vakances (NV) centros dimanta kristālā. Pirmajā promocijas darba daļā tiek aprakstīti magneto-optiskie efekti atomos – nelineāra magneto-optiskā gaismas polarizācijas plaknes rotācija (NMOR) rubīdija atomos. NMOR signāli rubīdija tvaikos tipiski tiek mērīti D_1 un D_2 ierosmes līnijās, kuru ierosme notiek infrasarkanās gaismas ietekmē. Ja ierosmei tiek izmantota augstākas frekvences gaisma, kas atbilst zilās gaismas spektra daļai, tad pamatstāvokļa repopulācija notiek caur vairākiem starpstāvokļiem. Šī pētījuma mērķis ir pārbaudīt un apstiprināt teorētisko modeli, kas apraksta sistēmu ar relaksāciju caur starpstāvokļiem, kā arī neizšķirti supersīkstruktūras līmeņiem ierosinātajā stāvoklī.

Promocijas darba otrā daļa ir balstīta uz magneto-optiskajiem efektiem NV centros. Šīs daļas mērķis ir izpētīt supersīkstruktūru un stāvokļu sajaukšanos, kas rodas elektronu un kodola spina mijiedarbības rezultātā, magnētiskā lauka klātbūtnē. 3. nodaļa apraksta modeli, kas ietver NV centra magnētisko apakšlīmeņu supersīkstruktūras nelineāro sašķelšanos un līmeņu sajaukšanos magnētiskajā laukā, kas atbilst līmeņu krustošanās vietām. Šajā nodaļā tiek modelēti optiski detektējami magnētisko rezonansu (ODMR) signāli. 4. nodaļā tiek analizēti rezultāti, kas tika iegūti, veicot skaitliskus aprēķinus kodolu spina polarizācijai NV centros plašā magnētiskā lauka apgabalā.

Kaut arī rubīdija atomi un NV centri ir atšķirīgas sistēmas, tām piemīt vairākas līdzības. NV centri tiek nereti saukti par atomiem līdzīgu sistēmu, tāpēc ka NV centra enerģijas līmeņu shēma ir līdzīga atomu enerģijas līmeņu shēmai. Tas sniedz iespēju aprakstīt NV centrus, izmantojot metodes, kas tiek pielietotas atomu pētījumos. Tomēr jāņem vērā arī NV centru cietvielu īpašības, piemēram, fononu relaksācija, kā arī tas, ka NV centru pamatstāvokļa magnētiskie apakšlīmeņi ir sašķēlušies arī bez ārēja magnētiskā lauka iedarbības. Sārmu metālu atomos spontānā relaksācija tiek novērota fluorescences veidā. Arī NV centros var tiks novērota fluorescence, bet atšķirībā no atomiem, NV centros relaksācija var notikt arī bezizstarojuma pāreju veidā caur fononu mijiedarbību. Šis relaksācijas ceļš notiek starp tripleta un singleta stāvokļiem un ir nozīmīgs efekts elektronu un kodola spina polarizācijas procesā.

Promocijas darbs ir balstīts uz teorētiskiem un skaitliskiem aprēķiniem, pamatojoties uz eksperimentiem, kas veikti Kalifornijas universitātē Berklijā, Latvijas Universitātes Lāzeru centrā un Johanner Gutenberg

universitātē Maincā. Sadarbība ar eksperimentu veicējiem radīja iespēju testēt un apstiprināt izveidoto modeļu precizitāti, kā arī analizēt un interpretēt eksperimentālos datus. Eksperimentu izveidē un norisē darba autore nav iesaistīta un šī daļa nav iekļauta promocijas darbā. Tomēr darba autore ir veikusi datu analīzi un izveidojusi datu apstrādes procedūras, kas ir iekļautas promocijas darbā.

1.1 Promocijas darba mērķis un uzdevumi

Promocijas darba mērķis ir izpētīt magneto-optiskos efektus divās atšķirīgās sistēmās – pielāgot un pārbaudīt teorētisko modeli nelineārai magneto-optiskai gaismas polarizācijas plaknes rotācijai atomārā rubīdijā, kā arī izpētīt supersīkstruktūras mijiedarbību slāpekļa–vakances centros, modelējot optiski detektējamu magnētisko rezonansu signālus un slāpekļa atoma kodola spina polarizāciju.

Promocijas darbā tika izvirzīti šādi uzdevumi:

1. Modeļa, kas raksturo NMOR, pielāgošana eksperimentālajiem apstākļiem, kas atbilst ierosmei ar zilo gaismo un kaskādes-veida spontānai relaksācijai.
2. Izpētīt supersīkstruktūras mijiedarbību NV centros magnētiskā lauka apgabalā, kas atbilst pamatstāvokļa līmeņu krustošanās apgabalam, un analizēt tādu faktoru ietekmi uz ODMR signāliem kā magnētiskā lauka virziena neprecizitātes attiecībā pret NV centra asi un kodola spina polarizāciju.
3. Veikt skaitliskus kodola spina polarizācijas aprēķinus NV centros un analizēt tādu parametru ietekmi un kodola spina polarizāciju kā leņķis starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra asi, relaksācijas pāreju ātrums, optiskās pumpēšanas ātrums un kristāla spriegums.

Ņemot vērā izvirzītos uzdevumus un darbā izmantotās metodes, promocijas darbā ir noformulētas šādas tēzes:

1. Lai iegūtu precīzāku nelineārās magneto-optiskās rotācijas teorētisko modeli, kas balstās uz izšķirtas un neizšķirtas supersīkstruktūras analīzi, ir jāņem vērā lāzera stara profila sadalījums, kas ļauj aprakstīt zilās gaismas NMOR eksperimentālos mērījumus rubīdija tvaikos ārējā magnētiskā lauka klātbūtnē.
2. Supersīkstruktūras līmeņu sajaukšanās ir atbildīga par ODMR signālu pīķu struktūru pamatstāvokļa līmeņu krustošanās tuvumā, un

šos signālus var izmantot, lai aprēķinātu ^{14}N kodola spina polarizāciju, relaksācijas laiku T_2^* (signāla platums) un leņķi starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra galveno asi.

3. Skaitliskais modelis, kura pamatā ir Lindblada vienādojums, kas piemērojams plašam magnētiskā lauka intensitātes vērtību diapazonam, parāda, ka ir iespējama augsta ^{14}N dinamiskā kodola spina polarizācija pamatstāvokļa līmeņu krustošanās tuvumā, bet neliels leņķis starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra galveno asi vai šķērsvirziena deformācijas spriegums gandrīz pilnībā iznīcina kodola spina polarizāciju.

1.2 Publikācijas un autores ieguldījums

Promocijas darbā aprakstīto pētījumu rezultāti ir publicēti trīs publikācijās.

- [P1] S. Pustelny, L. Busaite, M. Auzinsh, A. Akulshin, N. Leefer, and D. Budker, “Nonlinear magneto-optical rotation in rubidium vapor excited with blue light,” Physical Review A, vol. 92, no. 5, 2015.

Autores ieguldījums: Teorētisko aprēķinu veikšana, modeļa adaptācija, daļa eksperimentālo datu analīzes, salāgošanas procedūras izstrāde.

- [P2] M. Auzinsh, A. Berzins, D. Budker, L. Busaite, R. Ferber, F. Gahbauer, R. Lazda, A. Wickenbrock, and H. Zheng, “Hyperfine level structure in nitrogen-vacancy centers near the ground-state level anticrossing,” Physical Review B, vol. 100, p. 075204, 8 2019.

Autores ieguldījums: Modeļa izveide, adaptācija un signālu simulēšana, daļa eksperimentālo datu apstrādes un analīzes, salāgošanas procedūras izstrāde.

- [P3] L. Busaite, R. Lazda, A. Berzins, M. Auzinsh, R. Ferber, and F. Gahbauer, “Dynamic ^{14}N nuclear spin polarization in nitrogen-vacancy centers in diamond,” Physical Review B, vol. 102, p. 224101, 12 2020.

Autores ieguldījums: Modeļa izveide, adaptācija un signālu simulēšana, eksperimentālo datu apstrāde un analīze, eksperimentālo datu salāgošana.

1.2.1 Publikācijas, kas nav iekļautas promocijas darbā

- [P4] L. Skuja, K. Smits, A. Trukhin, F. Gahbauer, R. Ferber, M. Auzinsh, L. Busaite, L. Razinkovas, M. Mackoit-Sinkevičienė, and A. Alkauskas, “Dynamics of Singlet Oxygen Molecule Trapped in Silica Glass Studied by Luminescence Polarization Anisotropy and Density Functional Theory,” *Journal of Physical Chemistry C*, 2020.
- [P5] A. Mozers, L. Busaite, D. Osite, and M. Auzinsh, “Angular momentum alignment-to-orientation conversion in the ground state of Rb atoms at room temperature,” *Physical Review A*, vol. 102, p. 53102, 2020.
- [P6] R. Lazda, L. Busaite, A. Berzins, J. Smits, F. Gahbauer, M. Auzinsh, D. Budker, and R. Ferber, “Cross-relaxation studies with optically detected magnetic resonances in nitrogen-vacancy centers in diamond in external magnetic field,” *Physical Review B*, vol. 103, p. 134104, 2021.
- [P7] A. Mozers, L. Busaite, D. Osite, and M. Auzinsh, “Alignment-to-orientation conversion in the ground state of atomic Cs with linearly polarized laser excitation,” 2020.

1.3 Konferences

- [C1] Laima Busaite, Marcis Auzinsh, Szymon Pustelny, Dmitry Budker “Nonlinear Magneto-Optical Rotation in Atomic Rubidium at $6^2P_{J_e}$ Excitation”, mutiskais referāts, *Development in Optics and Communication 2013*, 10.–12. aprīlis, 2013, Rīga, Latvija.
- [C2] Laima Busaite, Marcis Auzinsh, Szymon Pustelny, Dmitry Budker “Theoretical and Experimental Investigation of NMOR in Atomic Rubidium at $6^2P_{J_e}$ Excitation”, stenda referāts, *The 21st International Conference on Laser Spectroscopy*, 9.–14. jūnijs, 2013, Bērklīja, ASV.
- [C3] Laima Busaite, Marcis Auzinsh, Szymon Pustelny, Dmitry Budker “Investigation of nonlinear magneto-optical rotation in atomic rubidium at 420 nm excitation”, mutiskais referāts, *TLL/Colima Joint Workshop*, 1.–5. septembris, 2013, Viļņa, Lietuva.

- [C4] Laima Busaite, Alexander Akulshin, Marcis Auzinsh, Szymon Pustelny, Dmitry Budker “Nonlinear Magneto-Optical Rotation in Rb Vapor Excited by Blue Light”, mutiskais referāts, *Development in Optics and Communication 2014*, 9.–12. aprīlis, 2014, Rīga, Latvija.
- [C5] Laima Busaite, Alexander Akulshin, Marcis Auzinsh, Szymon Pustelny, Dmitry Budker, Nathan Leefer “Nonlinear Magneto-Optical Rotation in Rubidium Vapor Excited to $6^2P_{1/2}$ State”, stenda referāts, *47th conference of the European Group on Atomic Systems*, 14.–17. jūlijs, 2015, Rīga, Latvija.
- [C6] Laima Busaite, Alexander Akulshin, Marcis Auzinsh, Szymon Pustelny, Dmitry Budker, Nathan Leefer “Nelineāra magneto-optiskā rotācija rubīdija tvaikos zilās gaismas ierosmē”, mutiskais referāts, *Latvijas Universitātes 74. zinātniskā konference*, 2. februāris, 2016, Rīga, Latvija.
- [C7] Laima Busaite, Reinis Lazda, Marcis Auzinsh, Janis Smits, Linards Kalvans, Agris Spiss “Theoretical Modelling of Optically Detectable Magnetic Resonances in Nitrogen-Vacancy Centres in Diamond”, stenda referāts, *Open Reading 2016*, 15.–18. marts, 2016, Viļņa, Lietuva.
- [C8] Laima Bušaite, M. Auziņš, A. Bērziņš, R. Ferber, F. Gahbauer, L. Kalvans, R. Lazda, J. Smits, “Level Crossing Optically Detectable Magnetic Resonance Signals in Nitrogen–Vacancy Centres in Diamonds”, mutiskais referāts, *1st TLL Workshop “Quantum and Non-linear Optics with Rydberg-State Atoms”*, 10.–11. novembris, 2016, Rīga, Latvija.
- [C9] Laima Bušaite, Mārcis Auziņš, Ruvins Ferbers, Florians Gahbauers, Reinis Lazda, “Optiski detektējamo magnētisko rezonāņu signāli slāpekļa-vakanču centros dimanta kristālā liela magnētiskā lauka klātbūtnē”, mutiskais referāts, *Latvijas Universitātes 75. zinātniskā konference*, 1. februāris, 2017, Rīga, Latvija.
- [C10] Laima Busaite, Marcis Auzinsh, Andris Berzins, Ruvins Ferber, Florian Gahbauer, Reinis Lazda “Optically Detectable Magnetic Resonance Signals in Nitrogen - Vacancy Centres in Diamond Near Ground State Level Crossing”, stenda referāts, *Open Reading 2017*, 14.–17. marts, 2017, Viļņa, Lietuva.

- [C11] Laima Busaite, Marcis Auzinsh, Andris Berzins, Ruvín Ferber, Florian Gahbauer, Reinis Lazda “Level anti-crossing studies in nitrogen–vacancy centers in diamond crystals”, stenda referāts, *The 23rd International Conference on Laser Spectroscopy*, 3.–7. jūlijs, 2017, Arcachon Convention Centre, Francija.
- [C12] Laima Bušaite, Mārcis Auziņš, Ruvins Ferbers, Florian Gahbauers, Reinis Lazda, “Optiski detektējamo magnētisko rezonanšu signālu izpēte slāpekļa-vakanču centros līmeņu krustošanās tuvumā”, mutiskais referāts, *Latvijas Universitātes 76. zinātniskā konference*, 2. februāris, 2018, Rīga, Latvija.
- [C13] Laima Busaite, Marcis Auzinsh, Andris Berzins, Ruvín Ferber, Florian Gahbauer, Reinis Lazda “Level anti-crossing signal dependence on nitrogen-vacancy centre’s orientation in magnetic field”, mutiskais referāts, *Open Readings 2018*, 20.–23. marts, 2018, Viļņa, Lietuva.
- [C14] Laima Busaite, Marcis Auzinsh, Andris Berzins, Ruvín Ferber, Florian Gahbauer, Reinis Lazda “Calculating the Influence of ^{13}C Interaction to Nitrogen – Vacancy Center Level Anti-Crossing Optically Detectable Magnetic Resonance Signals”, stenda referāts, *Open Readings 2019*, 19.–22. marts, Viļņa, Lietuva.
- [C15] Laima Bušaite, Reinis Lazda, Andris Berziņš, Mārcis Auziņš, Ruvins Ferber, Florian Gābauers, “Optiski inducēta kodola spina polarizācija NV centros dimanta kristālā”, mutiskais referāts, *Latvijas Universitātes 78. zinātniskā konference*, 28. janvāris, 2020, Rīga, Latvija.
- [C16] Laima Busaite, Reinis Lazda, Andris Berzins, Marcis Auzinsh, Ruvín Ferber, and Florian Gahbauer “Dynamic nuclear spin polarization in Nitrogen–Vacancy centers in diamond”, stenda referāts, *The 52nd Conference of the European Group on Atomic Systems (EGAS)*, 6.–8. jūlijs, 2021, Zagreba, Horvātija (virtuālā konference).
- [C17] Laima Busaite, Arturs Mozers, Dace Osite, Marcis Auzinsh, Ruvín Ferber, Florian Gahbauer “Development of a 3D single-port magnetometer based on magneto-optical resonances in an alkali vapor”, stenda referāts, *The 52nd Conference of the European Group on Atomic Systems (EGAS)*, 6.–8. jūlijs, 2021, Zagreba, Horvātija (virtuālā konference).

2 Nelineāra magneto-optiskā rotācija zilās gaismas ierosmei rubīdija tvaikos

Liela daļa pētījumu, kas saistīti ar NMOR tiek veikti, ierosinot sārnu metālu atomu spēcīgās D_1 un D_2 līnijas, kas atbilst sīkstruktūras pārejām $5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{1/2}$ un $5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{3/2}$. Šiem pētījumiem motivācija galvenokārt ir balstīta uz to, ka NMOR sārnu metālu D_1 un D_2 līnijām var tikt izmantota, lai radītu ārkārtīgi jutīgus magnetometrus [1]. Šo pētījumu rezultāti parāda labu sakritību starp eksperimentālajiem mērījumiem un teorētiskajām prognozēm [2, 3].

Pētījumā, kas ir daļa no šī promocijas darba, tiek pētīta citādāka sistēma. Šajā gadījumā tiek pētīta rubīdija atoma augstāka līmeņa ierosme ($5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$). Šīs pārejas pētīšana paver iespējas tādiem pielietojumiem kā zemūdens magnetometrija, ņemot vērā to, ka ierosme notiek ar redzamo gaismu spektra daļā, kas tiek daudzkārt mazāk absorbēta ūdenī nekā infrasarkanais starojums. Tomēr jāņem vērā, ka šādai sistēmai ir sarežģītāks pamatstāvokļa repopulācijas process, kas ietver vairākus starpstāvokļus ($6^2S_{1/2}$, $4^2D_{3/2}$, $5^2P_{1/2}$, $5^2P_{3/2}$, skatīt Attēlu 1a). Tas rada nepieciešamību analizēt dažādu relaksācijas ceļu ietekmi uz NMOR signāliem. Vēl viena atšķirība, salīdzinot ar D -līnijas ierosmi ir ierosinātā stāvokļa supersīkstruktūras sašķelšanās. Līmeņa $6^2P_{1/2}$ supersīkstruktūras sašķelšanās ir daudz mazāka par līmeņu $5^2P_{1/2}$ un $5^2P_{3/2}$ sašķelšanos. Līdz ar to šis pētījums sniedz iespēju izpētīt ierosinātā stāvokļa supersīkstruktūras sašķelšanās ietekmi uz pamatstāvokļa koherenču veidošanos un zondēšanu [4, 5].

Šajā pētījuma mēs pielietojam modeli, kas balstīts uz [4], rubīdija atomu ierosmei uz absorbcijas pāreju $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$. Aprēķinu rezultāti tika salīdzināti ar eksperimentālajiem datiem, kas iegūti, ierosinot un zondējot atomāros tvaikus ar 421 nm lāzeru. Pētījuma mērķis bija apstiprināt, ka modelis var tik izmantots reālai sistēmai, kas ietver dažādus relaksācijas kanālus, aproksimējot relaksāciju ar vienu parametru pamatstāvokļa repopulācijai.

Gaismas polarizācijas plaknes rotācijas mērījumi $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$ līnijai paver iespēju arī citam pielietojumam. Tā kā pāreja $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$ ir relatīvi vāja, šīs pārejas ierosme vāji perturbē atomāro vidi. Šī iemesla dēļ, nedestruktīva zonde, kas balstīta uz zilās gaismas polarizācijas plaknes rotāciju, varētu tikt izmantota kā zonde atdzesētiem un slazdotiem atomiem. Lai gan šādam mērķis varētu tikt izmantotas arī spēcīgākās D_1 vai D_2 līnijas ar zemāku lāzera jaudu, zilās gaismas ierosmei ir papildus priekšrocība. Atomu atdzesēšana un slazdošana parasti tiek veikta,

izmantojot infrasarkanus starus, tātad mērījumi ar zilo gaismu nodrošinātu lāzera staru spektrālo nošķiršanu, tādā veidā paaugstinot mērījumu precizitāti atomārā stāvokļa noteikšanai.

Šajā nodaļā mēs apskatīsim modeli, kas izveidots [4] atomārām sistēmām ar neizšķirtu supersīkstruktūru ierosinātajā stāvoklī Doplera paplašināšanās dēļ, un kas promocijas darba ietvaros tika pielāgots zilās gaismas ierosmei. Modelis raksturo polarizācijas plaknes rotāciju gaismai, kas šķērso atomārā rubīdija tvaika šūnu, ierosinot $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$ pāreju. Lai veiktu modeļa rezultātu salīdzināšanu ar eksperimentālajiem datiem, nepieciešams veikt modeļa adaptāciju eksperimentālajiem apstākļiem. Eksperimentā bija izmantota diafragma lāzera diametra regulēšanai, līdz ar to lāzera profils atšķīrās dažādiem stara diametriem, kas radīja nepieciešamību pielāgot ierosmes Rabi frekvenci un pamatstāvokļa relaksācijas ātrumu. Tad modelis tika testēts, salīdzinot aprēķinus ar eksperimentālajiem datiem, kas iegūti Kalifornijas universitatē Berklijā. Eksperimentus veica Dr. Šimons Puštelnijs un eksperimenta izveide un mērījumi neietilpst promocijas darbā. Šajā nodaļā aprakstītie rezultāti ir publicēti [6].

2.1 Liuvila vienādojums

Mijiedarbība starp atomiem tvaika šūnā un ārēju optisko un magnētisko lauku var tikt aprakstīta, izmantojot blīvuma matricas formālismu. Blīvuma matricas evolūcija laikā ar tikt aprakstīta, izmantojot Liuvila vienādojumu (šeit pieņemam, ka $\hbar = 1$, $c = 1$) [4]:

$$\dot{\rho} = -i[\hat{H}, \rho] - \frac{1}{2}\{\hat{\Gamma}, \rho\} + \hat{\Lambda} + \text{Tr}(\hat{\mathcal{F}}\rho), \quad (1)$$

kur $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ ir no laika neatkarīgs Hamiltoniāns, kas sastāv no neperturbēta sistēmas Hamiltoniāna \hat{H}_0 un mijiedarbības Hamiltoniāna \hat{V} . $\hat{\Gamma}$ ir relaksācijas operators, kas raksturo tādus procesus kā caurlidošanas relaksācija atomu termiskās kustības dēļ un ierosinātā stāvokļa relaksācija spontānās emisijas dēļ, $\hat{\Lambda}$ ir repopulācijas operators, kas raksturo no blīvuma matricas neatkarīgus repopulācijas procesus, piemēram, sadursmju ar šūnas sienām dēļ, savukārt $\hat{\mathcal{F}}$ ir no blīvuma matricas atkarīgs repopulācijas operators, kas raksturo tādus procesu kā pamatstāvokļa repopulācija spontānās emisijas dēļ. Spontānās emisijas operators ($\hbar = 1$, $c = 1$) tiek definēts [7] kā

$$\mathcal{F}_{mn}^{sr} = \frac{4}{3}\omega_{rm}^3 \mathbf{d}_{mr} \cdot \mathbf{d}_{sn}, \quad (2)$$

kas saista ierosinātā stāvokļa līmeņus $|s\rangle$, $|r\rangle$ ar pamatstāvokļa līmeņiem $|m\rangle$, $|n\rangle$. Pēda vienādojumā (1) aptver visus ierosinātā stāvokļa līmeņus.

Liuvila vienādojumu var pārrakstīt nereducējamo tenzoru bāzē [5], izmantojot polarizācijas momentus, lai izvēstu blīvuma, kā arī citus operatorus no vienādojuma (1). Liuvila vienādojums nereducējamo tenzoru bāzē ir uzrakstāms [4] kā

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{F_g F'_g}^{(\kappa q)} &= i(-1)^{F_g+F'_g+\kappa+1} \sum_{\kappa', \kappa'', q', q'', F''} \sqrt{(2\kappa'+1)(2\kappa''+1)} \langle \kappa' q' \kappa'' q'' | \kappa q \rangle \\
&\times \left\{ \begin{matrix} \kappa' & \kappa'' & \kappa \\ F'_g & F_g & F'' \end{matrix} \right\} \left[\left(H_{F_g F''}^{(\kappa' q')} - \frac{i}{2} \Gamma_{F_g F''}^{(\kappa' q')} \right) \rho_{F'' F'_g}^{(\kappa'' q'')} \right. \\
&- \rho_{F_g F''}^{(\kappa' q')} \left(H_{F'' F'_g}^{(\kappa'' q'')} + \frac{i}{2} \Gamma_{F'' F'_g}^{(\kappa'' q'')} \right) \left. \right] + \Lambda_{F_g F'_g}^{(\kappa q)} \\
&+ \frac{4}{3} \omega_0^3 \sum_{F_e, F'_e > F_g, F'_g} \langle F_g \| d \| F_e \rangle \rho_{F_e F'_e}^{(\kappa q)} \langle F'_e \| d \| F'_g \rangle \\
&\times (-1)^{F_e+F'_e+\kappa+1} \left\{ \begin{matrix} \kappa & F'_g & F_g \\ 1 & F'_e & F'_e \end{matrix} \right\}.
\end{aligned} \tag{3}$$

Lai varētu salīdzināt dažādas supersīkstruktūras pārejas, nepieciešams izteikt reducēto dipola matricas elementu supersīkstruktūras pārejai $\langle F_g \| d \| F_e \rangle$ caur reducēto dipola matricas elementu sīkstruktūras pārejai $\langle J_g \| d \| J_e \rangle$ [5]

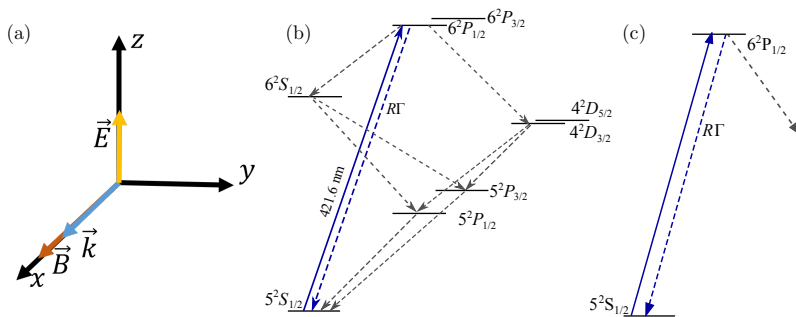
$$\langle F_g \| d \| F_e \rangle = (-1)^{J_e+I+F_g+1} \sqrt{(2F_g+1)(2F_e+1)} \left\{ \begin{matrix} J_e & F_e & I \\ F_g & J_g & 1 \end{matrix} \right\} \langle J_g \| d \| J_e \rangle, \tag{4}$$

kur I ir kodola spina kvantu skaitlis un J ir elektrona leņķiskā momenta kvantu skaitlis. Reducēto matricas elementu $\langle J_g \| d \| J_e \rangle$ var izrēķināt no [4]

$$R\gamma_e = \frac{4}{3} \frac{\omega_0^3}{2J_e+1} |\langle J_g \| d \| J_e \rangle|^2, \tag{5}$$

kur R ir sazarojuma attiecība pārejai $J_e \rightarrow J_g$, γ_e ir ierosinātā stāvokļa relaksācijas ātrums un ω_0 ir pārejas frekvence starp pamata un ierosināto stāvokli.

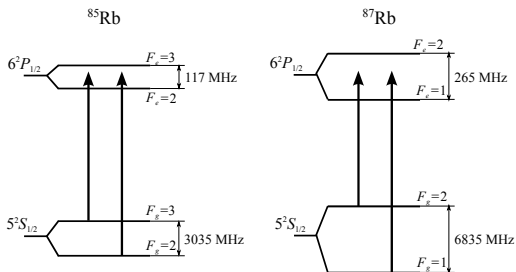
Pirmie divi locekļi vienādojumā (1) ir apvienoti vienādojumā (3) kā izteiksme zem summas zīmes. Otrais loceklis vienādojumā (3) raksturo no blīvuma matricas neatkarīgo repopulāciju un pēdējais loceklis raksturo no blīvuma matricas atkarīgo repopulāciju, kas rodas spontānās emisijas dēļ.



Att. 1: (a) Ierosmes ģeometrija. (b) Enerģijas līmeņi un pārejas Rb atomu ierosmei ar 421.6 nm viļņa garuma starojumu. (c) Vienkāršota līmeņu shēma, kas attēlo modelī izmantoto divu līmeņu shēmu. Nepārtrauktās līnijas attēlo ierosmes pārejas, pārtrauktās līnijas attēlo spontāno emisiju.

2.2 Atomārā sistēma

Aprēķinos izmantotā atomārā sistēma ir rubīdija atomu tvaiki, kuros atomu termiskais ātrums atbilst 85°C grādu temperatūrai. Atomi tiek ierosināti uz $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$ pāreju. Ierosinošā lāzera stars un magnētiskais lauks ir vērsts gar kvantēšanās asi (x asi), līdz ar to gaismas elektriskā lauka vektors ir perpendikulārs kvantēšanās asij un ir vērsts z ass virzienā. Ierosmes ģeometrija ir attēlota Attēlā 1a. Pamatstāvokļa repopulācija notiek caur spontāno relaksāciju gan tiešās pārejās uz pamatstāvokli $5^2S_{1/2}$, gan arī caur starpstāvokļiem ($6^2S_{1/2}$, $4^2D_{3/2}$, $5^2P_{1/2}$, $5^2P_{3/2}$) (Attēls 1b).



Att. 2: Enerģijas līmeņu shēma $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$ pārejām izotopiem ^{85}Rb un ^{87}Rb .

Modelis apraksta vienkāršotu sistēmu, kurā pamatstāvokļa repopulācija spontānās emisijas dēļ tiek raksturota ar vienu parametru, kas saistītas ar sazaršanās koeficientu R (Attēls 1c). Tātad kaskāžu pārejas

(Attēls 1b) ir aizstātas ar vienu koeficientu relaksācijai no ierosinātā uz pamatstāvokli. Katrā kaskāžu pārejā atomārā polarizācija samazinās [8], līdz ar to tiešās pārejas spēlē ievērojami lielāku lomu polarizācijas pārnese nekā pārejas caur starpstāvokļiem.

Attēlā 2 redzamas supersīkstruktūras pārejas rubīdija izotopiem ^{85}Rb un ^{87}Rb . Doplera platums, kas atbilst tvaika šūnas temperatūrai eksperimenta laikā (85°C), ir aptuveni 600 MHz, līdz ar to ierosinātā stāvokļa supersīkstruktūra ir neizšķirta zem Doplera platuma.

2.3 Teorētiskais modelis

Magneto-optiskā rotācija var tikt analizēta kā trīs soļu process. Tas sastāv no optiskās pumpēšanas, evolūcijas magnētiskajā laukā un atomārā stāvokļa zondēšanas. Pirmajā solī gaisma polarizē atomus, izmainot atomu īpašības un ieviešot vides anizotropiju. Gaismas polarizācija nosaka radītās anizotropijas asi. Otrajā solī pamatstāvokļa leņķiskā momenta anizotropija precesē ap magnētiskā lauka vektoru. Līdz ar precesiju notiek arī atomārā stāvokļa un vides anizotropijas relaksācijas process. Trešajā solī izmainītās vides īpašības mijiedarbojas ar zondējošo gaismu, kā rezultātā notiek gaismas polarizācijas plaknes rotācija. Eksperimentā, visi šie procesi notiek vienlaicīgi, bet, veidojot teorētisko modeli, šos soļus var aprakstīt neatkarīgi vienu no otra.

Lai aprakstītu kvantu sistēmas evolūciju, šajā pētījumā tiek izmantots blīvuma matricas formālisms. Gaismas mijiedarbība ar atomiem tiek aprakstīta semi-klasiski, izmantojot elektriskā dipola miēdarbības Hamiltoniānu. Līdz ar optisko ierosmi notiek arī spontānā emisija, kas Liuvila vienādojumā (1) tiek iekļauta kā spontānās emisijas operators $\hat{\Gamma}$ un operators repopulācijai caur spontāno emisiju $\hat{\mathcal{F}}$. Gan optiskā ierosme, gan spontānā emisija atbild par vides optisko pumpēšanu un polarizācijas radīšanu.

Reālā sistēmā, ierosinot pāreju $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$, ierosinātā stāvokļa relaksācija notiek caur vairākiem starpstāvokļiem (Attēls 1b). Šajā modelī tiek izmantots viens parametrs ierosinātā stāvokļa relaksācijas raksturošanai, jo polarizācijas pārnese no ierosinātā uz pamatstāvokli caur starpstāvokļiem ir daudz vājāka par tiešajām pārejām. Šis pētījums parāda, ka šāds pieņēmums ir pamatots un atomārā sistēma var tikt reducēta uz divu līmeņu sistēmu, ņemot vērā zemas intensitātes starojuma ierosmi un vāju magnētisko lauku [6].

Apskatot gadījumu, kad ierosinātā stāvokļa supersīkstruktūras sašķelšanās ir daudz mazāka par Doplera platumu ($\omega_{F_e F'_e} \ll \Gamma_D$) un pamat-

stāvokļa supersīkstruktūras sašķelšanās ir lielāka par dabīgo līnijas platumu ($\omega_{F_g F'_g} \gg \gamma_e$), polarizācijas plaknes rotācija var tikt izteikta kā

$$\begin{aligned}
\left\langle \ell_0 \frac{d\varphi}{dl} \right\rangle_v &= \frac{3}{8} \kappa_s \sum_{F_g F_e F'_e} (-1)^{2F_g + F'_e - F_e} \frac{(2F_e + 1)(2F'_e + 1)(2F_g + 1)}{(2I + 1)} \\
&\times \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ F_g & F_g & F'_e \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_e & F_e & I \\ F_g & J_g & 1 \end{Bmatrix}^2 \begin{Bmatrix} J_e & F'_e & I \\ F_g & J_g & 1 \end{Bmatrix}^2 x_{F_g} \\
&\times \left(\frac{(-1)^{2I + 2J_g}}{(2F_e + 1)(2F_g + 1)} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ F_g & F_g & F_e \end{Bmatrix} \right) \\
&+ R \sum_{F'_e} (-1)^{F_g - F'_e} (2J_e + 1)(2F_g + 1)(2F'_e + 1) \\
&\times \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ F_e & F'_e & F_g \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} F_g & F_g & 2 \\ F_e & F'_e & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_e & F'_e & I \\ F_g & J_g & 1 \end{Bmatrix}^2 \\
&\times \frac{2\gamma_e^4 + (2\gamma_e^2 + \omega_{F_e F'_e}^2)\omega_{F_e F'_e}\omega_{F'_e F'_e}}{2(\gamma_e^2 + \omega_{F_e F'_e}^2)(\gamma_e^2 + \omega_{F'_e F'_e}^2)} e^{-(\Delta_{F_e F_g}/\Gamma_D)^2} \frac{\gamma_e^2}{\gamma_e^2 + \omega_{F_e F'_e}^2}.
\end{aligned} \tag{6}$$

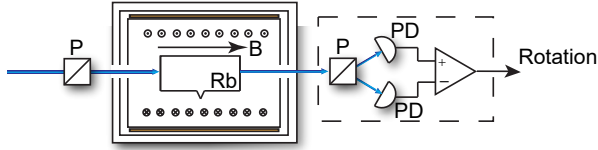
Šajā pētījumā vienādojums (6) tika izmantots, lai simulētu zilās gaismas ierosmes NMOR signālus, ņemot vērā Doplera paplašināšanos.

2.4 Modeļa pielāgošana eksperimentālajiem apstākļiem

Pētījuma eksperimentu veica Dr. Šimons Puštelnijs (Dr. Szymon Pustelny) Kalifornijas univeristātē Berklijā. Detalizēts eksperimentālās iekārtas apraksts atrodams disertācijas pielikumā. Eksperimentā frekvenču dubultota lāzera gaisma tiek vadīta caur rubīdija tvaika šūnu, kas ir ievietota četru slāņu cilindriskā μ -metāla vairogā (Attēls 3). Papildus spoles vairoga iekšpusē tika izmantotas magnētiskā lauka radišanai, nodrošinot to, ka magnētiskā lauka virziens sakrīt ar stara izplatīšanās virzienu. Gaisma, kas izplatās tvaika šūnā ir lineāri polarizēta. Stara diametrs tiek kontrolēts ar diafragmu. Pēc tvaika šūnas gaismas polarizācija tiek nomērīta, izmantojot divus polarizatorus, kas detektē divas ortogonālas lineārās polarizācijas komponentes I_1 un I_2 . Rotācijas leņķis tika aprēķināts [9] kā

$$\varphi = \frac{I_1 - I_2}{2(I_1 + I_2)}. \tag{7}$$

Eksperimentālo mērījumu process neietilpst promocijas darbā. To mēr datu analīzi un parametru piemeklēšanu, salīdzinot eksperimentālos



Att. 3: Vienkāršota eksperimentālā shēma.

un teorētiskos datus, veica promocijas darba autore un tā tiek iekļauta promocijas darbā. Lai pārbaudītu un apstiprinātu modeļa precizitāti, simulētie zilās gaismas ierosmes NMOR signāli tika salīdzināti ar eksperimentālajiem rezultātiem.

Lai problēma tiktu aprakstīta korekti, bija nepieciešams noteikt vairākus eksperimentālos parametrus. Ir divu veidu parametri – tādi, kas ir precīzi zināmi, piemēram, Larmora frekvence Ω_{F_g} un Doplera platums Γ_D , kurus var noteikt, zinot tvaika temperatūru, magnētiskā lauka stiprumu un ierosmes ģeometriju, un tādi, kuriem var sniegt aptuvenu novērtējumu, bet nepieciešama pielāgošana, lai varētu aprakstīt eksperimenta apstākļus, piemēram, Rabi frekvence Ω_R un caurlidošanas relaksācijas ātrums γ_g . Šo parametru pielāgošanai izmantosim fitēšanas parametrus k_R un k_γ .

Tā kā šajā gadījumā atomu-atomu sadursmju varbūtība ir maza, pamatstāvokļa relaksācijas ātrums galvenokārt ir atkarīgs no caurlidošanas laika caur lāzera staru. Vienkāršajā aprakstā var pieņemt, ka caurlidošanas relaksācijas ātrums ir vienāds ar atomu ātrumu perpendikulāri stara izplatīšanās virzienam dalītu ar vidējo atoma veikto ceļu cauri lāzera stara šķērsgriezumam. Tomēr atomu caurlidošanas relaksācijas ātruma apraksts dažādām ātruma grupām ir sarežģītāks [10]. Atomi, kuri kustās ar mazāku ātrumu, pavada vairāk laika lāzera stara ietekmē, līdz ar to šie atomi vairāk ietekmē NMOR signālus, tādējādi tos sašaurinot [10]. Lai ņemto vērā šo efektu, tika ieviests parametrs k_γ , kas koriģē caurlidošanas relaksācijas ātrumu

$$\gamma_g = k_\gamma \frac{v_{tr}}{r}, \quad (8)$$

kur $v_{tr} = \sqrt{k_B T / m}$ ir vidējais ātrums perpendikulāri stara izplatīšanās virzienam, m ir atoma masa, T ir tvaika temperatūra, k_B ir Bolcmaņa konstante un r ir stara rādiuss, kas cilindriskā eksperimenta ģeometrijā sakrīt ar vidējo ceļa garumu cauri stara šķērsgriezumam. Parametrs k_γ tika noteikts, fitējot simulēto dispersijas līkni ar eksperimentālajiem datiem (Attēls 5). Parametra vērtības atšķiras dažādiem diafragmas atvērumiem, bet tās saglabājas nemainīgas atkarībā no gaismas izskaņošanas un intensitātes. Mainoties stara diametram, izmainās arī atomu ātruma

grupu sadalījums, līdz ar to mainās NMOR signāla platums [10]. Noteiktās parametra k_γ vērtības dažādiem diafragmas atvērumiem ir redzamas Tabulā 1.

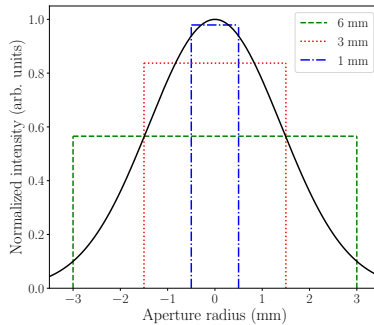
Otrs parametrs, kuram nepieciešama korekcija, lai salāgotu teorētiskos aprēķinus ar eksperimentālajiem signāliem, ir Rabi frekvence. Kaut arī Rabi frekvenci var noteikt no gaismas intensitātes, jāņem vērā, ka gaismas stara profilam nav vienmērīgs intensitātes sadalījums, un atomi, šķērsojot lāzera staru, tiek ierosināti ar dažādu intensitāti. Šo efektu var ņemt vērā, ieviešot parametru k_R , kas salāgo reālo stara profilu ar vienmērīgas intensitātes stara profilu. Līdz ar to Rabi frekvence var tikt izteikta kā

$$\Omega_R = k_R \frac{dE_0}{\hbar}, \quad (9)$$

kur $d = \langle J_g || d || J_e \rangle$ ir elektriskā dipola matricas elements, \hbar ir svītrotā Planka konstante (modelī tiek pieņemts, ka $\hbar = 1$) un E_0 ir gaismas elektriskā lauka amplitūda, caur kuru var izteikt gaismas intensitāti

$$I = \frac{\epsilon_0 n c E_0^2}{2} \left[\frac{\text{mW}}{\text{cm}^2} \right], \quad (10)$$

kur ϵ_0 ir dielektriskā konstante, n – gaismas laušanas koeficients, c – gaismas ātrums vakuumā.



Att. 4: Shematisks lāzera stara profila un diafragmas atvērumu ietekmes attēlojums.

Parametra k_R noteikšanai nepieciešams ņemt vērā gaismas stara Gausa profilu

$$I(r') = I_0 e^{-\frac{2r'^2}{\sigma^2}}, \quad (11)$$

kur I_0 ir maksimālā gaismas intensitāte stara centrā un σ ir sadalījuma pusplatums, kur intensitāte ir nokritusies par $1/e^2$. Gaismas staram sašņiedzot diafragmu, stara spārni tiek nogriezti, kā rezultātā izmainās stara profils (Attēls 4). Šajā modeli netiek ņemti vērā diafragmas radītie difrakcijas efekti. Līdz ar to gaismas kopēja intensitāte var tikt izteikta kā

$$P = 2\pi I_0 \int_0^{R_a} r' e^{\frac{2r'^2}{\sigma^2}} dr' = 2\pi I_0 \frac{\sigma^2}{8} \left(e^{\frac{4R_a^2}{\sigma^2}} - 1 \right), \quad (12)$$

kur R_a ir diafragmas apertūras rādiuss. Vienmērīgās intensitātes lāzera stara profils var tikt aprakstīts kā

$$P = I_1 \pi R_a^2, \quad (13)$$

kur I_1 ir normalizēta gaismas intensitāte. Lai varētu izmantot vienmērīgo intensitātes sadalījumu (13) Gausa sadalījuma (12) vietā, izmantojam parametru k_R :

$$k_R = \sqrt{\frac{I_0}{I_1}} = \sqrt{\frac{4R_a^2}{\sigma^2 \left(e^{\frac{4R_a^2}{\sigma^2}} - 1 \right)}} \quad (14)$$

Šis parametrs ir atkarīgs tikai no diafragmas apertūras rādiusa. Tas nav atkarīgs no lāzera jaudas. Lāzera stara rādiuss pirms diafragmas ir $\sigma = 2$ mm.

| d (mm) | k_γ | k_R^{calc} | k_R^{exp} |
|----------|------------|---------------------|--------------------|
| 1 | 0.17(1) | 1.02 | 1.04(1) |
| 3 | 0.23(2) | 1.15 | 1.30(2) |
| 6 | 0.42(7) | 1.60 | 1.62(7) |

Tabula 1: Aprēķinātie un eksperimentāli noteiktie parametri k_γ un k_R dažādiem diafragmas apertūras rādiusiem.

Tabulā 1 ir redzami aprēķinātie parametri k_R^{calc} (noteikti, veicot aprēķinus, ņemot vērā stara profilu un diafragmas apertūras rādiusu) un eksperimentāli noteiktie parametri k_R^{exp} (noteikti salāgojot teorētiskās rotācijas signālu dispersijas līknes ar eksperimentālajiem datiem) dažādiem diafragmas atvērumiem. Var redzēt, ka parametru vērtības ir atkarīgas no stara diametra, ko raksturo diafragmas apertūras rādiuss. Maksimālais diafragmas atvērums ļauj atomiem mijiedarboties ar staru, kura profils ir ļoti tuvs Gausa profilam, savukārt apertūras rādiuss 1 mm izveido stara

profilu, kas ir tuvs vienmērīgam sadalījumam. Pirmajā gadījumā, kad patiesais stara profils stipri atšķiras no vienmērīga intensitātes sadalījuma, k_R vērtība ir daudz lielāka par 1, savukārt otrajā gadījumā, kad stara profils ir tuvs vienmērīgam sadalījumam, parametra k_R vērtība ir tuvu 1.

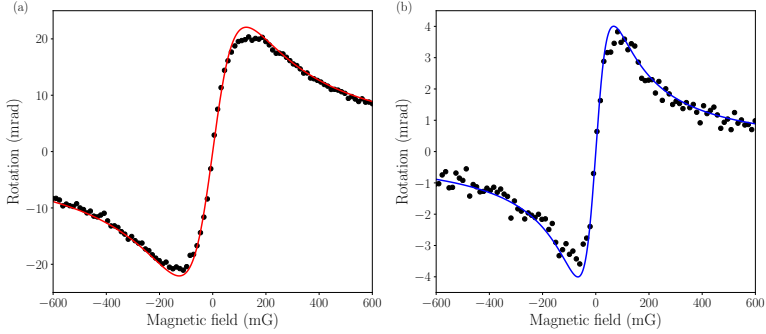
2.5 Rezultāti

Teorētiskās NMOR līknes tika rēķinātas izmantojot parametrus k_γ un k_R atbilstoši Tabulai 1. Attēlā 5 redzams eksperimentālo un teorētisko signālu salīdzinājums. Salīdzinot D_1 līnijas NMOR signālu (Attēls 5a) ar zilās gaismas NMOR signālu (Attēls 5b), ir redzams, ka abos gadījumos signāli ir centrēti ap nulles magnētisko lauku un atbilst dispersijas sadalījumam. Zilās gaismas rotācijas signāla amplitūda ir 4 mrad un platums ir 80 mG. Signāla platums tiek definēts kā magnētiskā lauka starpība starp signāla maksimumu un minimumu. Amplitūda tiek definēta kā maksimālā rotācija. NMOR signāla amplitūda D_1 līnijai ir aptuveni piecas reizes lielāka, kaut gan zilās gaismas rotācija tika mērīta 85°C temperatūrā, bet D_1 līnijas rotācija tika mērīta istabas temperatūra 23°C, līdz ar to tvaika blīvums bija trīs reizes mazāks D_1 līnijas mērījumos [6]. Abos gadījumos lāzera intensitāte bija vienāda (1.9 mW/cm² ar diafragmas apertūru 1 mm) un lāzera frekvence tika noskaņota atbilstoši pārējai no tā paša pamatstāvokļa $F_g = 3$. Teorētiskajos aprēķinos tika izmantoti parametri, kas atbilst eksperimenta temperatūrai, gaismas intensitātei un diafragmas apertūrai. Rabi frekvence zilās gaismas polarizācijas plaknes rotācijas aprēķinos ir $\Omega_R = 0.57$ MHz un D_1 līnijas aprēķinos ir $\Omega_R = 3.6$ MHz. Kaut gan gaismas intensitāte abos gadījumos ir vienāda, Rabi frekvence zilās gaismas ierosmei bija daudz mazāka, salīdzinot ar D_1 ierosmi, elektriskā dipola momenta $d = \langle J_g || d || J_e \rangle$ (9) atšķirības dēļ.

Magnētiskā lauka inducētās anizotropijas atšķirība dod iespēju izmantot zilās gaismas NMOR kā vāji perturbējošu zondi. Salīdzinot šo divu pāreju signālu platumus, redzams, ka $5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{1/2}$ pārejai (D_1 līnija) platums ir divas reizes lielāks kā $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$ pārejai. Šī platumu atšķirība nāk no jaudas paplašināšanās, kas ir dominējošā D_1 līnijai.

2.5.1 Gaismas polarizācijas plaknes rotācijas spektrs

Attēlā 6 redzama rotācijas atkarība no zilās gaismas frekvences izskaņošanas no rezonanses frekvences, attēlojot tipisku gaismas polarizācijas plaknes rotācijas spektru. Melnie punkti ir eksperimentālie dati magnētiskajā laukā 8 mG, kur signāls ir tuvu maksimālajai rotācijai un gaismas intensi-

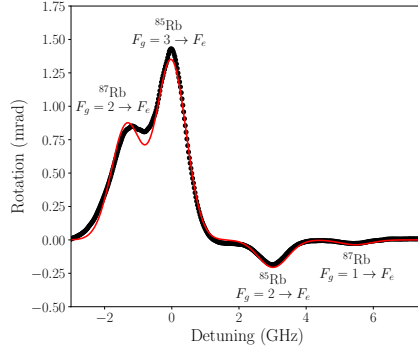


Att. 5: (a) Lineāri polarizēta infrasarkanā starojuma rotācija supersīkstruktūras pārejai $^{85}\text{Rb } F_g = 3 \rightarrow F_e$ sīkstruktūras pārejai $5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{1/2}$ (D_1 līnija). (b) Lineāri polarizētas zilās gaismas rotācija supersīkstruktūras pārejai $^{85}\text{Rb } F_g = 3 \rightarrow F_e$ sīkstruktūras pārejai $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$. Melnie punkti atbilst eksperimentālajiem datiem un nepārtrauktās līknes ir teorētisko aprēķinu signāli (a) $\Omega_R = 0.57$ MHz un (b) $\Omega_R = 3.6$ MHz.

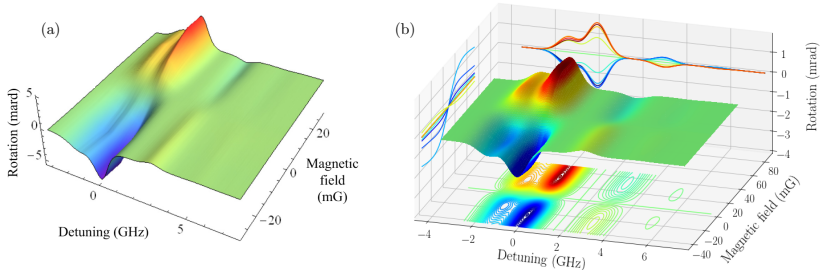
tāte ir $\sim 0.1 \text{ mW/cm}^2$. Sarkanā nepārtrauktā līkne ir aprēķinātais spektrs. Atomi no dažādām ātruma grupām nemijiedarbojas, tāpēc katras ātruma grupas atomi dod neatkarīgu ieguldījumu signālā. Tas ļauj aprēķināt teorētisko signālu, vienkārši summējot dažādu ātruma grupu atomu ieguldījumu (6). Šī pieeja tika izmantota, lai aprēķinātu Attēlā 6 parādītos NMOR spektrus. Kā redzams, aprēķināto spektru sakritība ar eksperimentālajiem datiem ir laba.

Spēcīgākā polarizācijas rotācija tika novērota ^{85}Rb pārejai $F_g = 3 \rightarrow F_e$. Šīs pārejas rotācija bija gandrīz divas reizes lielāka nekā otra lielākā pīķa rotācijas amplitūda $F_g = 2 \rightarrow F_e$ pāreja no ^{87}Rb . Rotāciju attiecība šajās divās pārejās ir aptuveni tāda pati kā absorbcijas attiecība tajās pašās pārejās, lai gan ^{87}Rb un ^{85}Rb Landē faktoru attiecība ir $\frac{2}{3}$. Tas ļauj secināt, ka spektra virsotnes atbilst dažādiem NMOR signāla punktiem. Tas nozīmē, ka ^{87}Rb rotācija jau pārsniedz maksimālo līmeni, savukārt ^{85}Rb rotācija joprojām palielinās līdz ar magnētisko lauku. Citas pārejas (^{85}Rb pāreja $F_g = 2 \rightarrow F_e$ un ^{87}Rb pāreja $F_g = 1 \rightarrow F_e$) rada daudz vājākus signālus. Tomēr šajā gadījumā NMOR signāla amplitūdu starpība ir daudz lielāka nekā pāreju absorbcijas starpība. Turklāt pamatstāvokļa supersīkstruktūras līmeņu Landē faktoru pretējās zīmes dēļ rotācija šajās pārejās ir pretēja attiecībā pret spēcīgākām ^{85}Rb izotopa $F_g = 3 \rightarrow F_e$ un ^{87}Rb izotopa $F_g = 2 \rightarrow F_e$ pārejām

Attēlā 7 parādīti gan eksperimentālie (Attēls 7a), gan teorētiskie

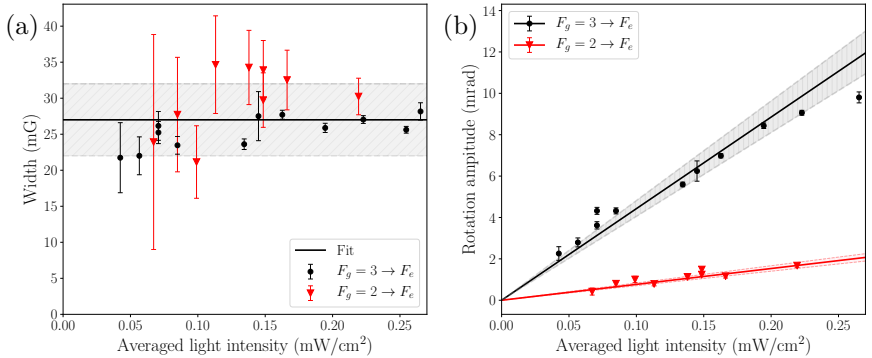


Att. 6: Eksperimentālais rotācijas spektrs (melnie punkti), kas mērīts ar nemainīgu gaismas intensitāti (0.1 mW/cm^2) un teorētiskais rotācijas spektrs (sarkanā līkne), kas aprēķināts Rabi frekvencei $\Omega_R = 0.19 \text{ MHz}$. Signāli tika iegūti, skenējot ierosmes frekvenci caur visām $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$ līnijas pārejas.



Att. 7: (a) Eksperimentālais rotācijas spektrs dažādiem magnētiskā lauka stiprumiem, kas mērīts ar nemainīgu gaismas intensitāti (0.1 mW/cm^2). Signāli tika iegūti, skenējot ierosmes frekvenci caur visām $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$ līnijas pārejas. (b) Teorētiskais rotācijas spektrs dažādiem magnētiskā lauka stiprumiem, Rabi frekvence $\Omega_R = 0.19 \text{ MHz}$.

(Attēls 7b) rotācijas spektrālās un magnētiskā lauka atkarības 3D grafiks. Eksperimentālie dati un teorētiskie aprēķini apstiprina Attēla 6 analīzi. Ir skaidri redzams, ka ^{87}Rb pāreja $F_g = 2 \rightarrow F_e$ sasniedz maksimālo rotācijas vērtību pie zemākām magnētiskā lauka vērtībām nekā ^{85}Rb pāreja $F_g = 3 \rightarrow F_e$.



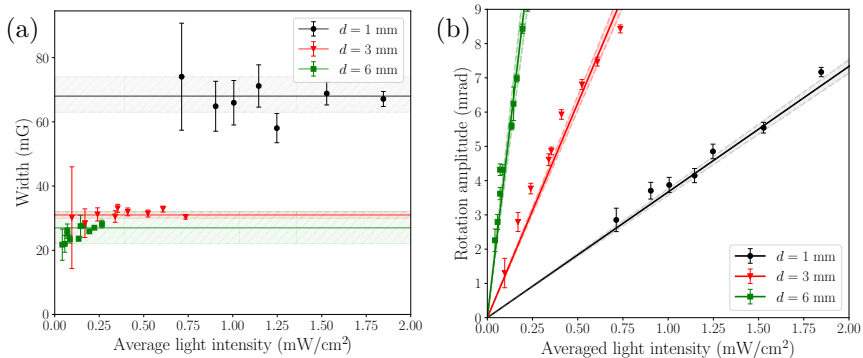
Att. 8: Rotācijas signālu (a) platuma un (b) amplitūdas atkarība no gaismas intensitātes pārejām no zemes stāvokļa supersīkstruktūras līmeņa $F_g = 3$ (melnie punkti) un $F_g = 2$ (sarkanie trijstūri). Signāli tik mērīti 85°C temperatūrā ar stara diametru 6 mm. Nepārtrauktās līnijas apraksta teorētiskos aprēķinus. Iekrāsotie apgabali iezīmē parametru k_γ un k_R nenoteiktību.

2.5.2 NMOR signālu atkarība no gaismas intensitātes

Lai tālāk pārbaudītu teorētiskā modeļa precizitāti, kā arī pārbaudītu NMOR procesa izpratni, tika pētīta gaismas polarizācijas plaknes rotācijas signālu atkarība no gaismas intensitātes. Attēlā 8a parādīts, ka zilās gaismas rotācijas signāla platums nav atkarīgs no gaismas intensitātes. Dati rāda, ka platums nav atkarīgs arī no supersīkstruktūras pārejas. Tajā pašā laikā signāla amplitūdas atkarība no intensitātes norāda uz NMOR nelineāro raksturu. Attēlā 8b parādīta zilās gaismas polarizācijas plaknes rotācijas signāla amplitūda pret vidējo gaismas intensitāti divām ^{85}Rb pārejām – $F_g = 3 \rightarrow F_e$ un $F_g = 2 \rightarrow F_e$ (Attēls 2). Šīm pārejām ir atšķirīga amplitūdas atkarība no gaismas intensitātes atšķirīgo pārejas dipola matricas elementu dēļ. Modelis šīs atšķirības labi atveido, eksperimentālo datu un aprēķinu sakritību var raksturot ar koeficientu $R^2 > 0.9$.

2.5.3 Stara diametra ietekme uz NMOR signāliem

Rotācijas signāla atkarība no stara diametra (Attēls 9) bija vēl viens veids, lai pārbaudītu metodes un modeļa piemērotību. Attēla 9 dati parāda izmērītā signāla platumu un amplitūdu attiecībā pret vidējo gaismas intensitāti. Rabi frekvenču diapazons teorētiskajiem aprēķiniem bija 0.48 – 1.19 MHz stara diametram 1 mm, 0.15 – 0.43 MHz stara diametram



Att. 9: Rotācijas signālu (a) platuma un (b) amplitūdas atkarība no gaismas intensitātes dažādiem diafragmas atvērumiem: 1 mm (melni punkti), 3 mm (sarkani trīsstūri), 6 mm (zaļi kvadrāti). Signāli tika mērīti pārejai no pamatstāvokļa supersīkstruktūras līmeņa $F_g = 3$ 85°C temperatūrā. Nepārtrauktās līnijas apraksta teorētiskos aprēķinus. Iekrāsotie apgabali iezīmē parametru k_γ un k_R nenoteiktību.

3 mm un 0.12 – 0.31 MHz stara diametram 6 mm. Amplitūdas atkarība no vidējās gaismas intensitātes (Attēls 9b) parāda dažādus slīpuma koeficientus trim dažādām diafragmas apertūrām (3.7 ± 0.1 mrad(cm²/mW) stara diametram 1 mm, 12.5 ± 0.4 mrad(cm²/mW) stara diametram 3 mm un 22 ± 2 mrad(cm²/mW) stara diametram 6 mm). Tas izriet no fakta, ka pamatstāvokļa relaksācijas ātrums šajos trīs gadījumos ir atšķirīgs, tāpēc atšķiras arī pārejas piesātinājuma līmenis. Vēl viens faktors, kas jāņem vērā, lai pienācīgi reproducētu NMOR signālu atkarības, ir diafragmas radītie dažādie staru profili eksperimentā (Attēls 4), kas tiek ņemts vērā ar parametru k_R (Tabula 1). Apvienojot šos divus ieguldījumus, iespējams teorētiski reproducēt eksperimentālos datus ar precizitāti $R^2 > 0.9$.

Rotācijas signāla platums nav atkarīgs no gaismas intensitātes, bet platums ir atkarīgs no stara diametra (Figure 9a). Turklāt saistība starp signāla platumu un apertūras diametru nav viennozīmīga. Eksperimentāli noteiktie platumi diafragmas atvērumam 3 mm un 6 mm kļūdas robežās ir gandrīz vienādi (31 ± 1 mG diafragmas atvērumam 3 mm un 27 ± 4 mG diafragmas atvērumam 6 mm), bet diafragmas atvērumam 1 mm signāla platums ir aptuveni divas reizes lielāks. Šis efekts nav saistīts ar jaudas paplašināšanos, jo zilās gaismas radītais NMOR signāls netiek paplašināts, tāpēc šis efekts ir saistīts ar atšķirīgu optiskā pumpēšanas dinamiku dažādiem staru diametriem [10] un dažādiem staru profiļiem (Figure 4). Tā kā stara diametrs pirms diafragmas ir 4 mm, diafragmas apertūras 3 mm

un 6 mm mazāk ietekmē gaismas intensitātes profilu. Diafragmas apertūra 6 mm izlaiž cauri gandrīz visu stara šķērsgriezumu un apertūra 3 mm nogriež nelielu stara šķērsgriezuma daļu.

2.6 Secinājumi

Šīs sadaļas rezultāti apraksta nelineāro magneto-optisko gaismas polarizācijas plaknes rotāciju pārejas līnijai $5^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$. Šīs pārejas ierosmes cikla dinamika atšķiras no D_1 vai D_2 līnijām, pateicoties ierosināto atomu sabrukšanai caur vairākiem starpstāvokļiem. Teorētiskais modelis tika piemērots šai ierosmes pārejai, kaskādes relaksācijas pārejas aizstājot ar vienu relaksācijas parametru, kas raksturo tiešās pārejas uz pamatstāvokli.

Teorētiskais modelis tika pielāgots zilās gaismas ierosmei, ņemot vērā eksperimenta apstākļus un attiecīgi pielāgojot modeļa parametrus. Sakarā ar diafragmas izmantošanu, lai eksperimentā kontrolētu stara diametru, tika aprēķināta un pielāgota Rabi frekvence Ω_R un pamatstāvokļa relaksācijas ātrums γ_g , izmantojot salāgošanas parametrus k_R un k_γ .

Teorētiskais modelis apraksta eksperimentālos datus, atveidojot tādās īpašības kā rotācijas amplitūda, platums un rotācijas spektrs atomiem termiskajā kustībā tvaika šūnā. Šie rezultāti nav acīmredzami, jo atomu sistēmā tikai 15% atomu atgriežas pamatstāvoklī tiešā veidā, bet 85% atgriežas pamatstāvoklī caur vairākiem starpstāvokļiem.

Rezultāti sniedz ne tikai fundamentālu izpratni par nelineāru magneto-optisko gaismas polarizācijas plaknes rotāciju, ko izraisa gaisma, kas saista pamatstāvokli ar augstākiem ierosinātajiem stāvokļiem, bet arī norāda uz iespēju izmantot šādu ierosmes shēmu magnetometrijas lietojumos. Piemēram, zilā gaisma mazāk absorbējas ūdenī, kas būtu noderīgi tādiem pielietojumiem kā zemūdens magnetometrija [11].

3 Optiski detektējamu magnētisko rezonansu signālu modelēšana slāpekļa – vakances centros dimanta kristālā ārējā magnētiskā lauka klātbūtnē

Slāpekļa–vakances (NV) centri dimantos ir punktveida defekti, kas sastāv no slāpekļa atoma, kas atrodas blakus režģa vakancei. NV centri var tikt izmantoti kā kvantu sensori. NV centra tripleta pamatstāvokli iespējams polarizēt, ierosinot NV centru ar zaļās gaismas lāzera starojumu [12–17]. No tā izriet, ka lāzera inducētā sarkanās gaismas fluorescences intensitāte ir atkarīga no pamatstāvokļa polarizācijas. Turklāt ārējā magnētiskā lauka ietekmē notiek pamatstāvokļa magnētisko apakšlīmeņu $m_S = \pm 1$ Zēmana sašķelšanās, kas padara sistēmu jutīgu pret magnētisko lauku [18]. Kā jau cietvielu sistēmai, NV centra pamatstāvokļa magnētiskajiem apakšlīmeņiem ir relatīvi ilgs koherences laiks [19], kas ļauj veikt pētījumus eksperimentāli interesantās laika skalās, īpaši tad, ja tiek izmantotas dinamiskās impulsu metodes, kas ir aizgūtas no kodolu magnētiskās rezonanses nozares [20, 21]. NV centrs, kas ir daļa no kristāla režģa, piedāvā mērogojamu sistēmu, sākot no viena NV centra, lai sasniegtu maksimālu telpisko izšķirtspēju, līdz makroskopiskam ansamblim, lai uzlabotu magnētiskā lauka jutīgumu. Ir pētījumi, kuros sasniegta pikotesla magnētiskā lauka jutība [22, 23]. NV centri tiek arī izmantoti, lai attēlotu mikroskopisku magnētisko struktūru magnētiskā lauka sadalījumu [24–26], tostarp arī dzīvās šūnās [27]. Kā arī tiek veikti pētījumi, kuros izmanto NV centrus, lai veiktu eksperimentus pikolitra tilpuma analītos [21]. Uz NV centriem balstītas tehnoloģijas ietver arī temperatūras un spiediena sensorus [28].

Lielākajai daļai NV centru pielietojumu ir nepieciešamas zināšanas par detalizētu NV centra enerģijas līmeņa struktūru, ieskaitot supersikstruktūru, kas rodas, elektrona spinam mijiedarbojoties ar ^{14}N atoma, kas ir daļa no NV centra, kodola spinu. Šajā darba sadaļā mēs analizēsim supersikstruktūras līmeņu mijiedarbību magnētiskajā laukā, kas atbilst pamatstāvokļa līmeņu antikrustošanās (GSLAC) punktam, kas noved pie spēcīgas supersikstruktūras līmeņu sajaukšanās un pāreju varbūtību izmaiņām starp elektronu spina magnētiskajiem apakšlīmeņiem.

Šajā pētījumā tika veikta optiski detektējamu magnētisko rezonansu (ODMR) signālu modelēšana, lai izpētītu pamatstāvokļa elektronu spina pāreju $m_S = 0 \rightarrow m_S = +1$ un $m_S = 0 \rightarrow m_S = -1$ pamatstāvokļa līmeņu krustošanos tuvumā. Modelis ņem vērā elektronu spina stāvokļa supersikstruktūras līmeņu sajaukšanos, lai aprēķinātu līmeņu struktūru

un pārejas stiprumu starp atsevišķiem supersīkstruktūras līmeņiem. Mēs arī analizējam ārējā magnētiska lauka virziena novirzes no NV centra ass ietekmi uz ^{14}N kodola spina polarizācijas un ODMR signāliem. Tāpat modelim tika izmantota *Monte Carlo* metode, lai pētītu NV centru mijiedarbību ar kristāla režģī esošajiem ^{13}C atomu kodoliem, tādā veidā nosakot ^{13}C atomu ietekmi uz ODMR signāliem. Lai pārbaudītu modeli, mēs izmantojam parametru optimizācijas procedūru, lai eksperimentāli izmērītās līknes salāgotu ar teorētisko aprēķinu rezultātiem.

3.1 NV centra enerģijas līmeņu struktūra

NV centra tripleta stāvokļa enerģijas struktūru var aprakstīt ar Hamiltoniānu

$$\hat{H}_{\text{NV}} = \hat{H}_S + \hat{H}_N + \hat{H}_B + \hat{H}_{\text{strain}}, \quad (15)$$

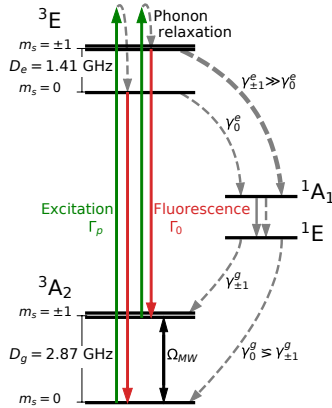
kur \hat{H}_S ir sīkstruktūras Hamiltoniāns, \hat{H}_N raksturo supersīkstruktūras mijiedarbību starp NV centra elektrona spinu un NV centrā ietilpstošā slāpekļa kodola spinu. \hat{H}_B ir magnētiskās mijiedarbības Hamiltoniāns, un \hat{H}_{strain} apraksta NV centra deformācijas sprieguma (*strain*) un elektriskā lauka mijiedarbību.

NV centra elektroniskā enerģijas struktūra sastāv no pamatstāvokļa tripleta 3A_2 , ierosinātā stāvokļa tripleta 3E un diviem singleta stāvokļiem $-^1E$ un 1A_1 (Attēls 10). Šajā darbā tiek apskatīti NV centri istabas temperatūrā, tāpēc zemās temperatūras efekti uz NV centru ierosināto stāvokli [29] netiks aprakstīti. Pamatstāvokļa triplets ir sašķelts spina spina mijiedarbības starp diviem nesapārotiem elektroniem dēļ. Līdz ar to nulles magnētiskajā laukā pamatstāvokļa magnētiskie apakšlīmeņi $m_S = \pm 1$ ir nobīdīti par $D_g = 2.87$ GHz attiecībā pret magnētisko apakšlīmeni $m_S = 0$. Ierosinātajā stāvoklī apakšlīmeņi ir nobīdīti līdzīgā veidā par $D_e = 1.41$ GHz. Ierosinātais stāvoklis ir atdalīts no pamatstāvokļa par 1.95 eV.

NV centra pamatstāvokļa un ierosinātā stāvokļa sīkstruktūras Hamiltoniānu var izteikt [12, 30] kā

$$\hat{H}_S = \hat{\mathbf{S}}\hat{D}\hat{\mathbf{S}} = D \left[\hat{S}_z^2 - S(S+1)/3 \right], \quad (16)$$

kur operatori \hat{S}_x , \hat{S}_y un \hat{S}_z ir elektrona spina $S = 1$ operatora Dekarta komponentes. Parametrs $D = D_g = 2.87$ GHz [31] raksturo nulles lauka sašķelšanos starp apakšlīmeņiem pamatstāvoklī un $D = D_e = 1.41$ GHz [31] – ierosinātajā stāvoklī.



Att. 10: Slāpekļa – Vakances centra enerģijas līmeņu struktūra

Lai pilnībā aprakstītu slāpekļa - vakances centra līmeņu struktūru, jāņem vērā mijiedarbība ar tuvumā esošajiem kodola spiniem. NV centra sastāvā esošā slāpekļa atoma kodols mijiedarbojas ar NV centra elektrona spinu. Lielākā daļa (99.6%) no šiem slāpekļa kodoliem ir ^{14}N , kuru kodola spins ir $I = 1$. ^{14}N kodola spina mijiedarbības ar elektrona spinu Hamiltoniānu var uzrakstīt kā

$$\begin{aligned} \hat{H}_N &= Q\hat{I}_z^2 + \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{I}} \\ &= Q\hat{I}_z^2 + A_{\parallel}\hat{S}_z\hat{I}_z + A_{\perp}\left(\hat{S}_x\hat{I}_x + \hat{S}_y\hat{I}_y\right), \end{aligned} \quad (17)$$

kur $Q = -4.96$ MHz [20] ir kodola spina kvadrupola mijiedarbības parametrs un $\hat{\mathbf{A}}$ ir supersīkstruktūras mijiedarbības tensors. Pamatstāvoklī tenzora elementu vērtības ir $A_{\parallel}^g = -2.14$ MHz un $A_{\perp}^g = -2.70$ MHz [20]. Ierosinātajā stāvoklī supersīkstruktūras mijiedarbība ir stiprāka, un tenzora elementu vērtības ir $A_{\parallel}^e = -40$ MHz un $A_{\perp}^e = -23$ MHz [32].

Šajā promocijas darbā izklāstītajā pētījumā tiek izmantots fakts, ka dimanta NV centra enerģijas līmeņi ir jutīgi pret magnētisko lauku. Zēmana mijiedarbības dēļ pamatstāvokļa līmeņi nobīdās magnētiskajā laukā. NV centra mijiedarbības ar magnētisko lauku Hamiltoniānu patvaļīgā virzienā attiecībā pret NV centra asi var izteikt [33] kā

$$\begin{aligned} \hat{H}_B &= g_e\mu_B\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} - g_I\mu_N\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{I}} \\ &= g_e\mu_B (B_xS_x + B_yS_y + B_zS_z) - g_I\mu_N (B_xI_x + B_yI_y + B_zI_z), \end{aligned} \quad (18)$$

kur magnētiskais lauks ir izteikts Dekarta koordinātēs NV centra atskai-

tes sistēmā $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$, $g_e = -2.0023$ un $g_I = 0.4037$ ir attiecīgi elektrona un ^{14}N kodola spina Landē faktori, un $\mu_B = 1.4 \text{ MHz/G}$ un $\mu_N = 0.76 \text{ kHz/G}$ ir Bora magnetons un kodola magnetons. Magnētiskā lauka Dekarta komponentes var izteikt ar leņķiem starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra asi

$$B_x = B \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi \quad (19a)$$

$$B_y = B \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi \quad (19b)$$

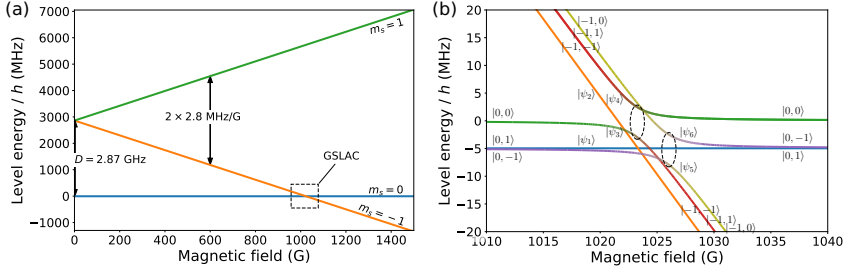
$$B_z = B \cdot \cos \theta. \quad (19c)$$

Tā kā NV centram piemīt C_{3v} simetrija, φ var tikt izvēlēts patvaļīgi, piemēram, $\varphi = 0$. Šajā gadījumā paliek tikai viens parametrs magnētiskā lauka virziena noteikšanai attiecībā pret NV centra asi $\mathbf{B} = (B \sin \theta, 0, B \cos \theta)$.

NV centra elektrona spins mijiedarbojas arī ar kristāla spriegumu, kas tiek asociēts ar deformācijas spriegumu (*strain*) un elektrisko lauku [33]. Tā kā deformācijas sprieguma un elektriskā lauka mijiedarbības locekļi vienādojumā ir uzrakstāmi vienādā formā, šajā gadījumā mēs atsevišķi neizteiksim elektriskā lauka mijiedarbību. Līdz ar to turpmāk tiks apskatīti parametri, kuri ietver kopā gan deformācijas sprieguma, gan elektriskā lauka mijiedarbību. Pieņemot, ka elektriskā lauka mijiedarbība ir vāja, kopējo deformācijas sprieguma un elektriskā lauka mijiedarbību ar elektrona spinu sauksim par deformācijas sprieguma mijiedarbību. Hamiltoniānu, kas raksturo NV centra spinu mijiedarbību deformācijas sprieguma ietekmes dēļ, var izteikt kā

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{strain}} = & M_z S_z^2 + M_x \left(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2 \right) + M_y \left(\hat{S}_x \hat{S}_y + \hat{S}_y \hat{S}_x \right) \\ & + N_x \left(\hat{S}_x \hat{S}_z + \hat{S}_z \hat{S}_x \right) + N_y \left(\hat{S}_y \hat{S}_z + \hat{S}_z \hat{S}_y \right), \end{aligned} \quad (20)$$

kur M_z, M_x, M_y, N_x, N_y ir mijiedarbības konstantes [34–36], kas nosaka elektrona spina stāvokļu sajaukšanos deformācijas sprieguma mijiedarbību dēļ. Pie maza magnētiskā lauka stipruma $B < 10 \text{ G}$, elementi M_x un M_y saista magnētiskos apakšlīmeņus $m_S = +1$ un $m_S = -1$, kas rada šo līmeņu sašķelšanos. Pie lielākiem magnētiskajiem laukiem, šo elementu ietekme ir niecīga, jo līmeņu sašķelšanās Zēmana efekta dēļ ir daudz lielāka par šo elementu radīto mijiedarbību. Ja ārējais magnētiskais lauks sasniedz stiprumu, pie kura notiek līmeņu krustošanās, pieaug ietekme tām mijiedarbības komponentēm N_x un N_y , kas saista magnētiskos apakšlīmeņus $m_S = 0$ un $m_S = -1$. Deformācijas sprieguma izraisītā NV centra spinu mijiedarbība pamatstāvoklī ir ar kārtu daži megaherci, bet ierosinātajā stāvoklī ar kārtu daži desmiti megahercu [31, 37].



Att. 11: Pamatstāvokļa magnētiskie apakšlīmeņi magnētiskajā laukā B_z , kas pielikts NV centra ass virzienā. (b) Pamatstāvokļa supersīkstruktūras līmeņu ($|m_S, m_I\rangle$) antikrustošanos. Līmeņu sajaukšanās GSLAC tuvumā (apzīmēta ar elipsēm) ir apzīmēta ar krāsu pārejām katrai līknei. Vienkrāsainās līknes apzīmē līmeņus, kuriem nenotiek sajaukšanās.

3.2 Pamatstāvokļa līmeņu antikrustošanos supersīkstruktūras līmeņu sajaukšanās

Pamatstāvokļa magnētisko apakšlīmeņu $m_S = 0$ un $m_S = -1$ krustošanos notiek, kad Zēmana sašķelšanās magnētiskajā laukā $B_z = D_g/g_e\mu_B = 1024$ G kompensē nulles lauka sašķelšanos (Attēls 11a). Supersīkstruktūras mijiedarbības dēļ daži supersīkstruktūras līmeņi piedzīvo antikrustošanos (Figure 11b). Šo efektu sauc par pamatstāvokļa līmeņu antikrustošanos (GSLAC - *ground-state level anticrossing*). Ignorējot kodola spina mijiedarbību ar magnētisko lauku, pamatstāvokļa Hamiltoniāns (15) var tikt uzrakstīts kā

$$\hat{H}_g = D\hat{S}_z^2 + \gamma_e B_z \hat{S}_z + A_{\parallel} \hat{S}_z \hat{I}_z + A_{\perp} \left(\hat{S}_x \hat{I}_x + \hat{S}_y \hat{I}_y \right) + Q\hat{I}_z^2. \quad (21)$$

Līmeņu krustošanos punktā pamatstāvokļa apakšlīmeņu $m_S = 0$ un $m_S = -1$ sajaukšanos izraisa supersīkstruktūras tenzora \hat{A} šķērseniskais mijiedarbības loceklis A_{\perp} . Tā kā GSLAC tuvumā magnētiskais apakšlīmenis $m_S = +1$ ir atdalīts no apakšlīmeņiem $m_S = 0$ un $m_S = -1$ ar enerģiju, kas atbilst 5740 MHz, mijiedarbību starp $m_S = 0$ un $m_S = +1$ bāzes stāvokļiem var neņemt vērā, jo mijiedarbības stiprums ir daudz mazāks nekā sašķelšanās starp $m_S = 0$ un $m_S = +1$. Izmantojot aproksimāciju, ka mijiedarbība starp $m_S = 0$ un $m_S = +1$ bāzes stāvokļiem ir daudz vājāka, nekā mijiedarbība starp $m_S = 0$ un $m_S = -1$ bāzes stāvokļiem, analītiski var aprēķināt supersīkstruktūras stāvokļu aptuvenās īpašvērtības un

īpašvektorus. Enerģijas ir uzrakstāmas kā:

$$E_1 = Q, \quad (22a)$$

$$E_2 = \eta_+ + A_{\parallel} - \beta, \quad (22b)$$

$$E_3 = \frac{1}{2} \left(\eta_+ - A_{\parallel} - \beta - \sqrt{(2A_{\perp})^2 + (\eta_+ - A_{\parallel} - \beta)^2} \right), \quad (22c)$$

$$E_4 = \frac{1}{2} \left(\eta_+ - A_{\parallel} - \beta + \sqrt{(2A_{\perp})^2 + (\eta_+ - A_{\parallel} - \beta)^2} \right), \quad (22d)$$

$$E_5 = \frac{1}{2} \left(\eta_+ - \beta - \sqrt{(2A_{\perp})^2 + (\eta_+ - \beta)^2} \right), \quad (22e)$$

$$E_6 = \frac{1}{2} \left(\eta_+ - \beta + \sqrt{(2A_{\perp})^2 + (\eta_+ - \beta)^2} \right), \quad (22f)$$

$$E_7 = \eta_+ + A_{\parallel} + \beta, \quad (22g)$$

$$E_8 = \eta_+ - A_{\parallel} + \beta, \quad (22h)$$

$$E_9 = D + \beta. \quad (22i)$$

Un atbilstošās viļņu funkcijas nesaistītajā bāzē $|m_S, m_I\rangle$ ir uzrakstāmas sekojoši:

$$|\psi_1\rangle = |0, 1\rangle, \quad (23a)$$

$$|\psi_2\rangle = |-1, -1\rangle, \quad (23b)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{|\alpha_1^+|} |-1, 1\rangle - \frac{1}{|\alpha_1^+|} \left(\kappa_1 + \sqrt{\kappa_1^2 + 1} \right) |0, 0\rangle, \quad (23c)$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{|\alpha_1^-|} |-1, 1\rangle - \frac{1}{|\alpha_1^-|} \left(\kappa_1 - \sqrt{\kappa_1^2 + 1} \right) |0, 0\rangle, \quad (23d)$$

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{|\alpha_2^+|} |-1, 0\rangle - \frac{1}{|\alpha_2^+|} \left(\kappa_2 + \sqrt{\kappa_2^2 + 1} \right) |0, -1\rangle, \quad (23e)$$

$$|\psi_6\rangle = \frac{1}{|\alpha_2^-|} |-1, 0\rangle - \frac{1}{|\alpha_2^-|} \left(\kappa_2 - \sqrt{\kappa_2^2 + 1} \right) |0, -1\rangle, \quad (23f)$$

$$|\psi_7\rangle = |1, 1\rangle, \quad (23g)$$

$$|\psi_8\rangle = |1, -1\rangle, \quad (23h)$$

$$|\psi_9\rangle = |1, 0\rangle, \quad (23i)$$

kur

$$\kappa_1 = \frac{\eta_+ - A_{\parallel} - \gamma_e B}{2A_{\perp}}, \quad (24a)$$

$$\kappa_2 = \frac{\eta_- - \gamma_e B}{2A_{\perp}} \quad (24b)$$

un

$$|\alpha_{1,2}^{\pm}| = \sqrt{\left(\kappa_{1,2} \pm \sqrt{\kappa_{1,2}^2 + 1}\right)^2 + 1}. \quad (25)$$

Redzams, ka bāzes stāvokļi ar vienādiem $m_S + m_I$ sajaucas antikrustošanās ietekmē. Antikrustošanās notiek starp diviem stāvokļu pāriem. Viens pāris sastāv no stāvokļiem $|\psi_3\rangle$ un $|\psi_4\rangle$, otrs – no stāvokļiem $|\psi_5\rangle$ un $|\psi_6\rangle$. Stāvokļi $|\psi_1\rangle = |0, 1\rangle$ un $|\psi_2\rangle = |-1, -1\rangle$ nemijiedarbojas GSLAC tuvumā.

3.3 NV centru ODMR signālu modelēšana, iekļaujot supersīkstruktūru

Magnētiskās dipola pārejas starp supersīkstruktūras līmeņiem var izsaukt, pievadot mikroviļņu lauku. Izvēles likumi šādām pārejām ir $\Delta m_S = \pm 1$ un $\Delta m_I = 0$ [38–40]. Mikroviļņu pārejas starp līmeņiem $m_S = 0$ un $m_S = \pm 1$ var aprakstīt ar spina paaugstināšanas un pazemināšanas operatoriem:

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y, \quad (26)$$

kur S_x un S_y ir spina operatori spina stāvoklim $S = 1$. Kopumā ir deviņas viļņu funkcijas – trīs elektrona stāvokļi, kur katrs mijiedarbojas ar ^{14}N kodola spinu $I = 1$.

Visas atļautās pārejas tiek iegūtas, izmantojot operatora tenzoru reizinājumu ar identitātes matricu $\mathbf{1}(3)$ un iekļaujot šo reizinājumu 9×9 viļņu funkciju matricā, kuras kolonnas atbilst pamatstāvokļa īpašvektoriem $|\psi_i\rangle$ no (23)

$$\hat{S}'_{\pm} = \Psi^{\dagger} \left[\hat{S}_{\pm} \otimes \mathbf{1}(3) \right] \Psi. \quad (27)$$

Mijiedarbība ar mikroviļņu lauku var tikt uzrakstīta kā

$$\hat{H}_{INT}^{(m)} = \frac{\Omega_{MW}}{2} \left(\hat{S}'_{+} + \hat{S}'_{-} \right) = \begin{pmatrix} \mu'_{00} & \mu'_{0-1} & \mu'_{01} \\ \mu'_{-10} & \mu'_{-1-1} & \mu'_{-11} \\ \mu'_{10} & \mu'_{1-1} & \mu'_{11} \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}(3), \quad (28)$$

kur Ω_{MW} ir mikroviļņu starojuma Rabi frekvence. Matricas elementi μ'_{ij} ir proporcionāli magnētiska dipola pārejas matricas elementiem un raksturo pārejas varbūtības p'_{ij} starp līmeņiem i un j :

$$p'_{ij} = |\mu'_{ij}|^2. \quad (29)$$

Skenējot mikroviļņu frekvenci, tiek pieņemts, ka mikroviļņu lauka intensitāte ir nemainīga. Turklāt tiek pieņemts, ka mikroviļņu intensitāte nav atkarīga arī no mikroviļņu lauka polarizācijas, pamatojoties uz eksperimentā

izmantotās mikroviļņu antenas specifiku, kas aprakstīta nodaļā 3.6.3. Un tā kā gan aprēķinātie, gan eksperimentāli signāli tiek normēti, parametrs, kas raksturo mikroviļņu lauka intensitāti, netiek iekļauts aprēķinos.

Pāreju ātrums ir atkarīgs ne tikai no pārejas varbūtībām, bet arī no supersīkstruktūras apakšlīmeņu populācijas. ^{14}N kodola spina polarizācijas dēļ visi supersīkstruktūras bāzes stāvokļi netiek vienmērīgi apdzīvoti. Lai ņemtu vērā kodola spina polarizāciju, nepieciešams ieviest salāgošanas parametru, kas atbilst supersīkstruktūras bāzes stāvokļu relatīvajām populācijām. Rezonances pārejas ātrums t_{ij} var tikt izteikts kā pārejas varbūtības p'_{ij} un bāzes stāvokļa m_I relatīvās populācijas $N_i(m_I)$ reizinājums:

$$t_{ij} = p'_{ij} \cdot N_i(m_I) \quad (30)$$

Supersīkstruktūras bāzes stāvokļu populācijas ir normētas attiecībā pret $m_I = 1$ tā, ka $N(m_I = +1) = 1$, kas noved pie diviem salāgošanas parametriem $0 \leq N(m_I = 0), N(m_I = -1) \leq 1$, lai raksturotu kodola spina polarizāciju modeli. Līdz ar to kodola spina polarizācija var tikt aprēķināta [41] kā

$$P_{exp} = \frac{\sum_i m_I N_i(m_I)}{I \sum_i N_i(m_I)}, \quad (31)$$

kur m_I ir bāzes stāvokļu kodola spina projekcija un I ir kodola spina kvantu skaitlis. Summēšana tiek veikta pāri visām eksperimentālo ODMR eksperimentālo datu salāgošanā noteiktajām rezonanses pārejām.

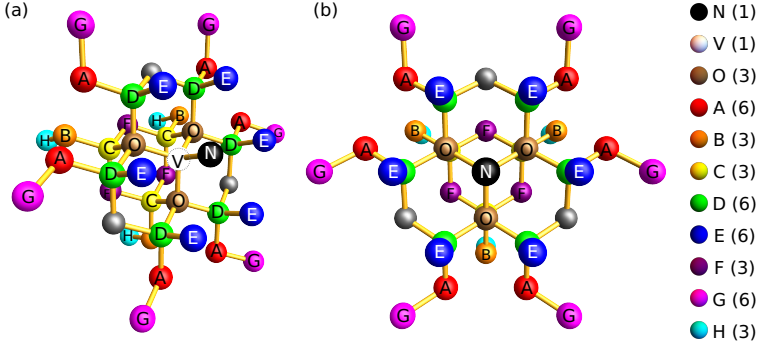
Aprēķinātās rezonanses pārejas frekvences un pārejas ātrumi tika izmantoti, lai simulētu ODMR spektru kā Lorenca līkņu summu katrai supersīkstruktūras pārejai:

$$f(\omega) = \sum_{\substack{i,j \\ j>i}} \frac{t_{ij} \cdot \gamma^2}{(\omega - \omega_{ij})^2 + \gamma^2}, \quad (32)$$

kur γ ir Lorenca platums, ω_{ij} – pārejas frekvence, t_{ij} – rezonanses pārejas ātrums.

3.4 ODMR signālu modelēšana, ņemot vērā tuvumā esošos ^{13}C kodola spinus

Dimanta kristāli lielākoties sastāv no oglekļa ^{12}C izotopiem. Tā kā ^{12}C kodolam spins ir nulle $I = 0$, kristāla režģa ^{12}C kodola spina mijiedarbība ar NV centra elektrona spinu nenotiek. Bet 1.1% oglekļa atomu dimanta režģī ir ^{13}C izotopi. ^{13}C kodola spins ir $I = \frac{1}{2}$. Lai varētu analizēt ^{13}C



Att. 12: Kristāla režģis ar ^{13}C iespējamām atrašanās vietām. (a) Sānu skats (b) Skats no augšas [111] virzienā.

atomu kodolu ietekmi uz kodola spina polarizāciju, NV centra Hamiltoniānam (15) nepieciešams pievienot mijiedarbību starp NV centru elektrona spinu un ^{13}C kodola spinu [30]:

$$H_{\text{NV}+^{13}\text{C}} = \sum_j \left(\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{A}'_{13\text{C},j} \cdot \hat{\mathbf{I}}_{13\text{C},j} + \hat{H}_{13\text{C},j} \right), \quad (33)$$

kur $\hat{\mathbf{I}}_{13\text{C},j}$ apzīmē j -to ^{13}C kodolu un $\hat{H}_{13\text{C},j} = \gamma_{13\text{C}} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{I}}_{13\text{C},j}$ ir mijiedarbības Hamiltoniāns, kas atbilst j -tajam ^{13}C kodolam. Ja šajā gadījumā ignorē deformācijas sprieguma ietekmi, kopējais NV centra Hamiltoniāns (15) ar ^{13}C kodolu spina mijiedarbību (33) ir uzrakstāms kā:

$$\hat{H}_g = \hat{H}_S + \hat{H}_N + \hat{H}_B + H_{\text{NV}+^{13}\text{C}}. \quad (34)$$

Monte Carlo metode tika izmantota, lai ņemtu vērā visas iespējamās mijiedarbības, vidējot pa iespējamām ^{13}C atrašanās vietām režģī (Attēls 12). Katrai iterācijai cikls izgāja caur 39 režģa pozīcijām, kurās ar varbūtību 1.1% varēja atrasties ^{13}C atoms. Un tādā gadījumā tika izmantots Hamiltoniāns (33) ar katrai pozīcijai atbilstošajiem supersikstruktūras tenzoriem [42, 43]. Katrs vienādojumam pievienotais ^{13}C atoms trīskāršo sistēmas enerģijas līmeņu skaitu $N_{\text{levels}} = 3 \times 3 \times 2^{N_{^{13}\text{C}}}$. Izmantojot kopējās sistēmas Hamiltoniāna īpašvērtības un īpašvektorus (34), ODMR spektri tika simulēti, kā aprakstīts nodaļā 3.3. Spektrs ir atkarīgs no ^{13}C atomu atrašanās vietas, kā arī no ^{13}C atomu skaita režģī, kā rezultātā katrai iterācijai ir atšķirīgi spektri. Lai ņemtu vērā visas statistiski nozīmīgās ^{13}C kodolu konfigurācijas NV centra tuvumā, bija nepieciešams vidējot vairākus simtus iterāciju.

3.5 Eksperimentālie dati

Eksperimentālos mērījumus galvenokārt veica Reinis Lazda, Andris Bērziņš un Huijie Zheng, eksperimentālās iekārtas apraksts ir izklāstīts disertācijas pielikumā un eksperimenta veikšana nav iekļauta šajā promocijas darbā. Tajā pašā laikā eksperimentālo datu analīzei bija izšķiroša nozīme izstrādājot modeli, ko varētu izmantot eksperimentālo signālu fitēšanai. Tāpēc promocijas darbā ir iekļauta datu analīze un salāgošanas procedūra.

Lielākā daļa eksperimentālo datu, kas analizēti šajā sadaļā, tika iegūti, mērot ODMR signālus diviem NV centru paraugiem ar atšķirīgu slāpekļa koncentrāciju. Tas ļāva piemērot modeļa aprēķinus, izmantojot dažādus parametrus, piemēram, signāla platumu, kas raksturo koherences relaksācijas laiku T_2^* , kodola spina polarizāciju un leņķi starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra asi. Viens paraugs tika iegūts ar ķīmisko tvaiku nogulsnešanos (CVD – *chemical vapor deposition*) ar slāpekļa koncentrāciju ap 1 ppm (zemas koncentrācijas paraugs). Otrs paraugs bija augsta spiediena, augstas temperatūras (HPHT – *high-pressure, high-temperature*) kristāls ar relatīvi augstu slāpekļa koncentrāciju aptuveni 200 ppm (augstas koncentrācijas paraugs). Mērījumi ar zemas koncentrācijas paraugu tika veikti Johanesa Gūtenberga-Universitātē Mainzē, savukārt mērījumi ar augstas koncentrācijas paraugu tika veikti Latvijas Universitātes Lāzeru centrā Rīgā. NV centri tika apstaroti ar zaļu 532 nm gaismu un optiski polarizēti $m_S = 0$ stāvoklī, un tika novērota sarkanā fluorescence no stāvokļa 3E (pārejas shēma Attēlā 10). Pēc ODMR metodes tika izmantots mikroviļņu lauks, lai izraisītu pārejas starp pamatstāvokļa apakšlīmeņiem. NV centrs tika nepārtraukti ierosināts, tādā veidā saglabājot polarizāciju $m_S = 0$ stāvoklī. Kad mikroviļņu lauks atrodas rezonansē ar pāreju no $m_S = 0$ supersīkstruktūras līmeņa uz $m_S = \pm 1$ supersīkstruktūras līmeni, fluorescence intensitāte samazinās.

Vēl viens mērījumu kopums, kas analizēts šajā sadaļā, tika veikts, izmantojot dimanta kristālu, kas iegūts, izmantojot CVD, ar slāpekļa ^{14}N koncentrāciju aptuveni 5–20 ppm. Eksperimenta rezultāti, kas parādīti Attēlā 21, apraksta ODMR signāla atkarību no leņķa starp magnētiskā lauka asi un NV centra asi. Šī eksperimenta iekārta ir aprakstīta disertācijas pielikumā.

Eksperimentālie dati tika salāgoti ar teorētiskajiem aprēķiniem, izmantojot modeli, kas aprakstīts nodaļā 3.3, izmantojot metodi `Model` no `python` bibliotēkas `lmfit` [44]. Salāgojot eksperimentālo ODMR signālu ar simulēto ODMR signālu, magnētiskā lauka vērtībai ir atļauts nedaudz

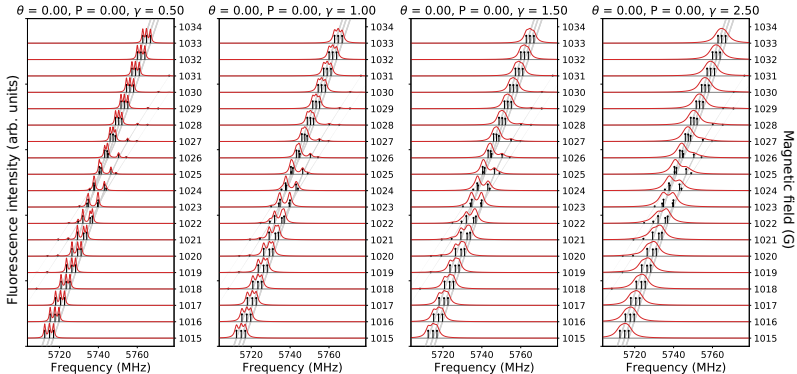
mainīties, jo kodola spina polarizācijas dēļ var nedaudz mainīties pīķa pozīciju signāliem ar tikai daļēji izšķirtu un neizšķirtu supersīkstruktūru. Salāgošanas parametri ir Lorenca platums (32), kodola spina polarizācija (31), magnētiskā lauka vērtība un magnētiskā lauka leņķis (18). Lai noteiktu visus šos parametrus, salāgošana tika veikta iteratīvi, izmantojot parametru optimizācijas procedūru, pamatojoties uz χ^2 testu. χ^2 ir definēts kā

$$\chi^2 = \frac{1}{N} \sum_i \left(\frac{f_i - d_i}{\sigma_i} \right)^2, \quad (35)$$

kur N ir brīvības pakāpe, d_i ir izmēritie datu punkti, f_i ir modelētie rezultāti un σ_i ir vidējās kvadrātiskās daru punktu kļūdas.

3.6 Rezultāti

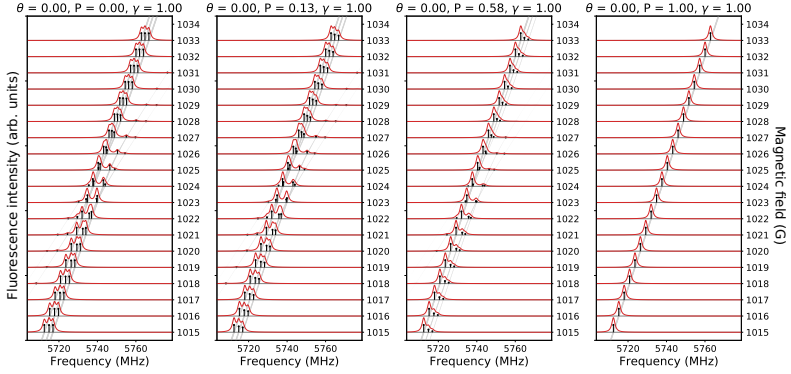
ODMR signāli tika aprēķināti dažādiem parametriem un salīdzināti ar eksperimentālajiem signāliem. Šīs sadaļas rezultāti ir publicēti [45] un [46].



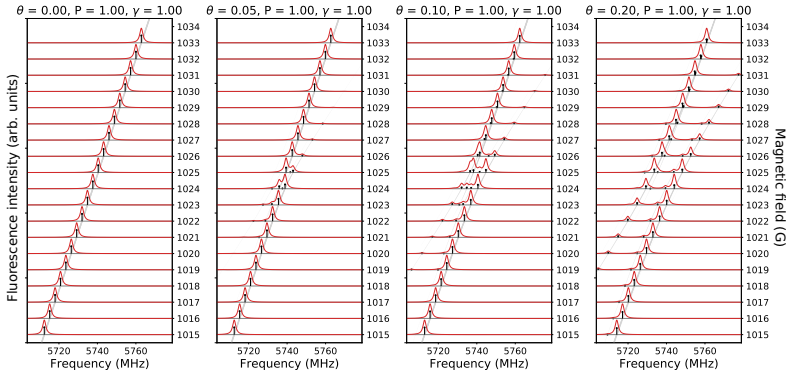
Att. 13: Modelētie ODMR signāli augstas frekvences reģiona atkarībai no pārejas platumam. No kreisās uz labo $\gamma = 0.5$ MHz, $\gamma = 1.0$ MHz, $\gamma = 1.5$ MHz, $\gamma = 2.5$ MHz. Kodola spina polarizācija ir $P = 0\%$, un leņķis starp NV centra asi un magnētisko lauku ir $\theta = 0^\circ$.

3.6.1 Modelētie ODMR signāli $|m_S = 0\rangle \rightarrow |m_S = +1\rangle$ pāreju kopumam

ODMR signāli tika modelēti dažādiem parametriem: pārejas platumam, leņķim starp magnētisko lauku un NV centra asi, kodola spina polarizā-



Att. 14: Modelētie ODMR signāli augstas frekvences reģiona atkarībai no kodolu spina polarizācijas. No kreisās uz labo $P = 0\%$, $P = 13\%$, $P = 58\%$, $P = 100\%$. Leņķis starp NV centra asi un magnētisko lauku ir $\theta = 0^\circ$ un profila platums ir $\gamma = 1.0$ MHz.



Att. 15: Modelētie ODMR signāli augstas frekvences reģiona atkarībai no leņķa starp NV centra asi un magnētiskā lauka virzienu. Leņķis θ ir loka grādos. No kreisās uz labo $\theta = 0.00^\circ$, $\theta = 0.05^\circ$, $\theta = 0.10^\circ$, $\theta = 0.2^\circ$. Kodola spina polarizācija ir $P = 100\%$ un profila platums ir $\gamma = 1.0$ MHz.

cijai. Šajā sadaļā mēs analizējam ODMR signālus GSLAC tuvumā mikroviļņu frekvencēm, kas atbilst NV centra pamatstāvokļa $|m_S = 0\rangle \rightarrow |m_S = +1\rangle$ pāreju kopumam.

Attēls 13 parāda ODMR signāla atkarību no Lorencas platuma (no kreisās uz labo) pārejas kopumam $|m_S = 0\rangle \rightarrow |m_S = +1\rangle$. Signāla platums atbilst ierosinātā stāvokļa koherences laika T_2^* , kas var būt ļoti

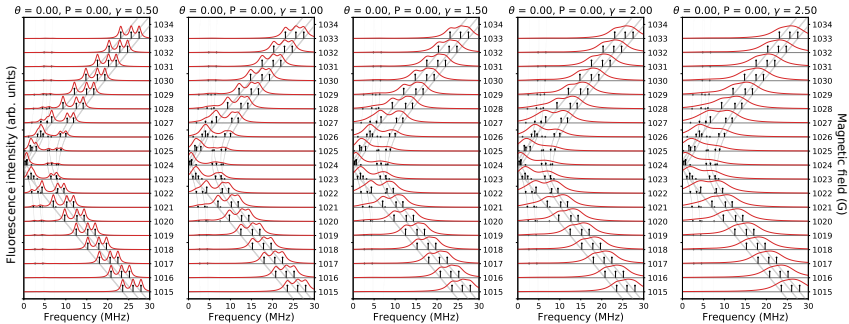
atšķirīgs atkarība no dimanta īpašībām. Šajā gadījumā tika pieņemts, ka nenotiek kodola spina polarizācija $P = 0\%$ un magnētiskais lauks ir vērsts gar NV asi $\theta = 0^\circ$.

Vēl viens parametrs, kas ietekmē ODMR signāla formu, ir kodola spina polarizācija. Attēlā 14 parādīta ODMR signāla atkarība no kodola spin polarizācijas. Ja kodola spina polarizācija ir 100% , šajā gadījumā netiek novērota antikrustošānās. Tika pieņemts, ka magnētiskais lauks ir vērsts gar NV asi $\theta = 0^\circ$ un profila platums $\gamma = 1.0$ MHz.

Attēlā 15 parādīta ODMR signāla atkarība no leņķa θ starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra asi (19). Var redzēt, ka pat neliels magnētiskā lauka leņķis var novest pie ievērojamās ODMR signāla izmaiņām GSLAC tuvumā. Tas notiek tāpēc, ka stāvokļos $|m_S = 0\rangle$ un $|m_S = -1\rangle$ notiek papildu sajaukšanās magnētiskā lauka šķērsvirziena komponentes dēļ un var novērot vēl vairāk pāreju. Šajā gadījumā tika pieņemts, ka kodola spina polarizācija ir $P = 100\%$ un profila platums ir $\gamma = 1.0$ MHz.

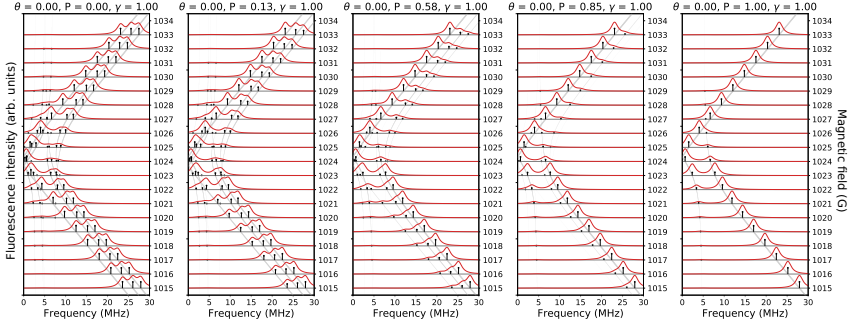
3.6.2 Modelētie ODMR signāli $|m_S = 0\rangle \rightarrow |m_S = -1\rangle$ pāreju kopumam

Analizējot modelētos ODMR signālus mikroviļņu lauka diapazonam, kas atbilst pamatstāvokļa $|m_S = 0\rangle \rightarrow |m_S = -1\rangle$ pāreju kopumam, mēs varam pamanīt, ka pie GSLAC notiek vēl vairāk pāreju nekā augsto frekvenču pārejām. Tas notiek tāpēc, ka abu stāvokļu $|m_S = 0\rangle$ un $|m_S = -1\rangle$ supersikstruktūras līmeņi, starp kuriem tiek novērotas pārejas, ir iesaistīti antikrustošānā.



Att. 16: Modelētie ODMR signāli zemās frekvences reģiona atkarībai no pārejas platuma. No kreisās uz labo $\gamma = 0.5$ MHz, $\gamma = 1.0$ MHz, $\gamma = 1.5$ MHz, $\gamma = 2.0$ MHz, $\gamma = 2.5$ MHz. Kodola spina polarizācija ir $P = 0\%$, un leņķis starp NV centra asi un magnētisko lauku ir $\theta = 0^\circ$.

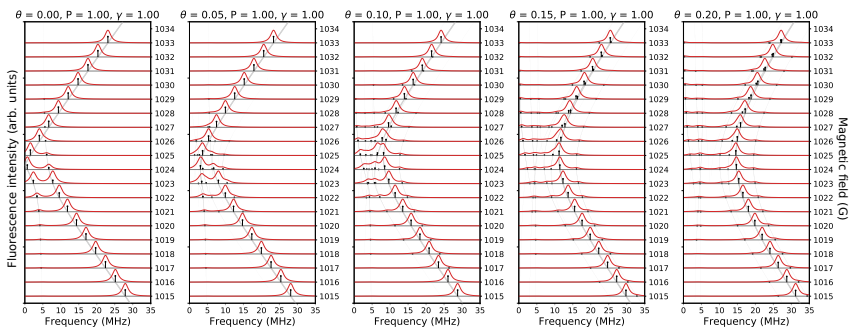
Attēls 16 parāda ODMR signāla atkarību no Lorenca platuma (no kreisās uz labo) pārejas kopumam $|m_S = 0\rangle \rightarrow |m_S = -1\rangle$. Platumam palielinoties, supersīkstruktūra kļūst neizšķirta. Attēlā 17 parādīta ODMR



Att. 17: Modelētie ODMR signāli zemās frekvences reģionā atkarībai no kodolu spina polarizācijas. No kreisās uz labo $P = 0\%$, $P = 13\%$, $P = 58\%$, $P = 85\%$, $P = 100\%$. Leņķis starp NV centra asi un magnētisko lauku ir $\theta = 0^\circ$ un profila platums ir $\gamma = 1.0$ MHz.

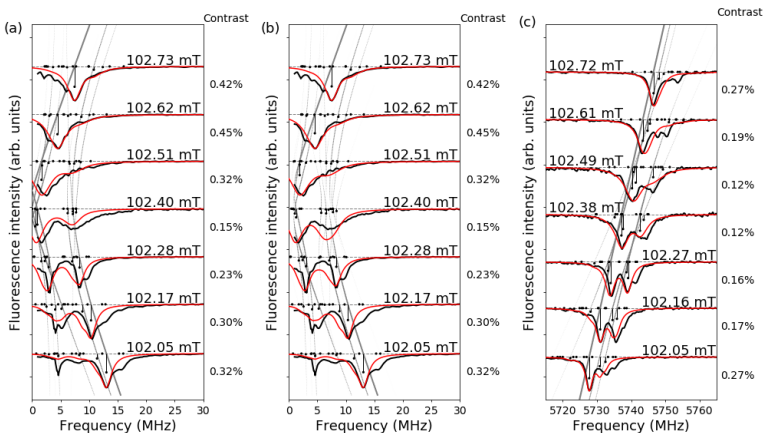
signāla atkarība no kodola spina polarizācijas. Atšķirībā no augstās frekvences pārejām, antikrustošanos joprojām var novērot ODMR signālos pat ar 100% kodola spina polarizāciju, atšķirībā no augstfrekvences reģiona (Attēls 14), kur antikrustošanos nevarēja novērot $P = 100\%$ gadījumā. Tas ir saistīts ar faktu, ka populācija akumulējas $|\psi_1\rangle = |m_S = 0, m_I = +1\rangle$ līmenī, un zemo frekvenču reģionā mēs varam novērot pārejas no šī līmeņa gan uz $|\psi_3\rangle$, gan $|\psi_4\rangle$ ar pārejas intensitāti, kas mainās atkarībā no magnētiskā lauka intensitātes.

Attēls 18 parāda ODMR signāla atkarību no leņķa θ starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra asi. Pat neliels magnētiskā lauka leņķis ietekmē ODMR signālus antikrustošanās tuvumā. Palielinot leņķi starp magnētisko lauku un NV centra asi, minimālā pārejas frekvence palielinās, tas nozīmē, ka šķērsvirziena magnētiskā lauka mijiedarbība izraisa arī to līmeņu sajaukšanos, kas iepriekš nebija iesaistīti antikrustošanās. Šajā brīdī visi līmeņi ir sajaukti, un reālu krustošanos nav, tāpēc pārejas frekvences nevar tuvojies 0 MHz. Palielinoties šķērsvirziena magnētiskajam laukam, mijiedarbība starp līmeņiem palielinās un pārejas frekvences attālinās no nulles frekvences.

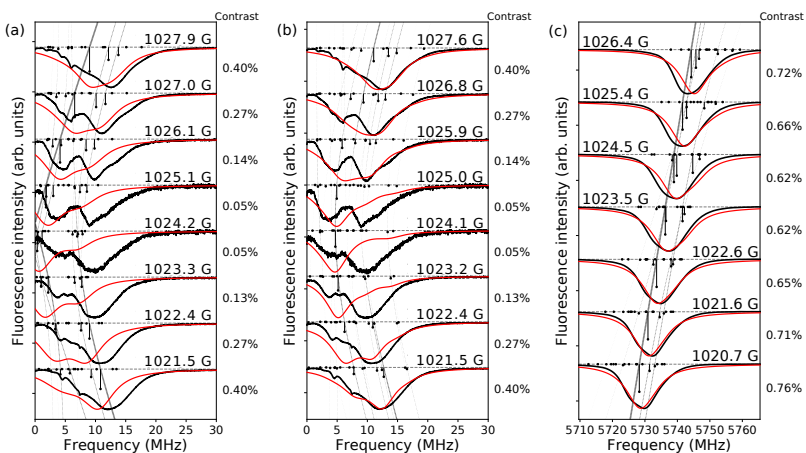


Att. 18: Modelētie ODMR signāli zemās frekvences reģiona atkarībai no leņķa starp NV centra asi un magnētiskā lauka virzienu. Leņķis θ ir loka grādos. No kreisās uz labo $\theta = 0.00^\circ$, $\theta = 0.05^\circ$, $\theta = 0.10^\circ$, $\theta = 0.15^\circ$, $\theta = 0.20^\circ$. Kodola spina polarizācija ir $P = 100\%$ un profila platums ir $\gamma = 1.0$ MHz.

3.6.3 Modelēto signālu salīdzinājums ar eksperimentāli izmērītajiem signāliem

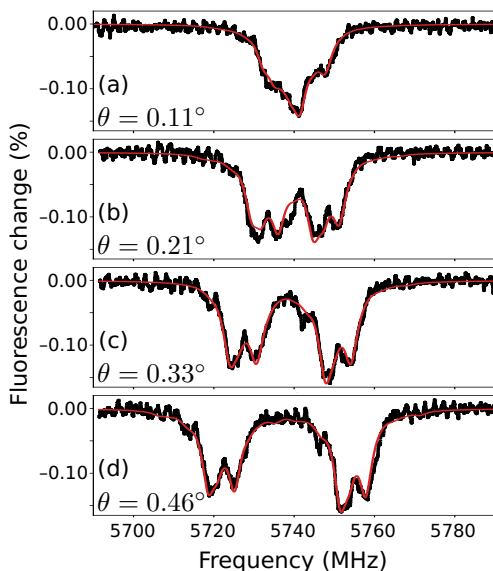


Att. 19: Eksperimentālie signāli (melni punkti), kas iegūti zemas koncentrācijas paraugā ar teorētiskiem aprēķiniem (sarkana līkne) pamatstāvokļa $m_S = 0 \rightarrow m_S = -1$ mikroviļņu pārejām dažādām magnētiskā lauka leņķa vērtībām starp NV asi un magnētisko lauku \mathbf{B} (a) $\theta = 0^\circ$ un (b) $\theta = 0.015^\circ$ (šķērsvirziena magnētiskais lauks 0.25 G). (c) Eksperimentālais signāls ar aprēķināto signālu pie $\theta = 0^\circ$ pamatstāvokļa $m_S = 0 \rightarrow m_S = +1$ mikroviļņu pārejām dažādām magnētiskā lauka vērtībām.



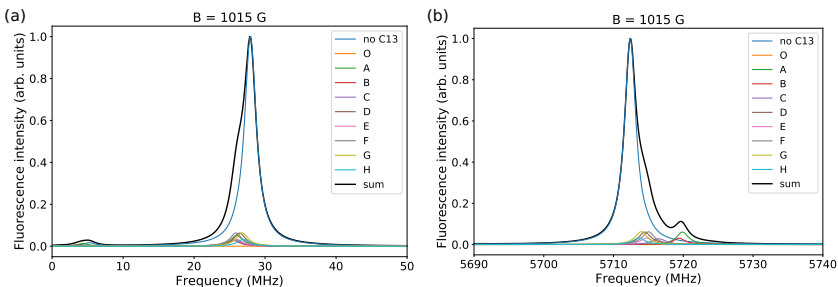
Att. 20: Eksperimentālie signāli (melni punkti), kas iegūti augstas koncentrācijas paraugā ar teorētiskiem aprēķiniem (sarkana līkne) pamatstāvokļa $m_S = 0 \rightarrow m_S = -1$ mikroviļņu pārejām dažādām magnētiskā lauka leņķa vērtībām starp NV asi un magnētisko lauku \mathbf{B} (a) $\theta = 0^\circ$ un (b) $\theta = 0.1^\circ$ (šķērsvirziena magnētiskais lauks 1.85 G). (c) Eksperimentālais signāls ar aprēķināto signālu pie $\theta = 0^\circ$ pamatstāvokļa $m_S = 0 \rightarrow m_S = +1$ mikroviļņu pārejām dažādām magnētiskā lauka vērtībām.

Attēli 19 (zemas NV koncentrācijas paraugs) un 20 (augstas NV koncentrācijas paraugs) detalizētāk parāda eksperimentālos un modelētos ODMR signālus GSLAC tuvumā. Lai nodrošinātu labāku lasāmību, signāli tika sakārtoti dilstošā magnētiskā lauka secībā, un katra līkne tika normēta atsevišķi, tās relatīvā intensitāte attēlota grafika labajā pusē. Pelēkās līnijas parāda, kā mainās enerģija un pāreju intensitāte magnētiskajā laukā. Salīdzinot Attēlus 19a, kur $\theta = 0^\circ$, un 19b ar $\theta = 0.015^\circ$, ir manāms uzlabojums, ieviešot nelielu leņķi modeli. Tas ir vēl labāk redzams Attēlos 20a un 20b augstas koncentrācijas paraugam. Pēc šiem signāliem mēs esam aprēķinājuši, ka leņķis starp magnētisko lauku un NV asi šim paraugam bija aptuveni $\theta = 0.1^\circ$, kas atbilst šķērsvirziena magnētiskajam laukam pie GSLAC $B_x = 1.85$ G, kura kārtā sakrīt ar Zemes magnētiskā lauku, kas eksperimentā netika kompensēts. Zemās frekvences pārejas starp $|m_S = 0\rangle$ un $|m_S = -1\rangle$ ir jutīgākas pret līmeņu sajaušanos un magnētiskā lauka leņķi, jo abi pārejās iesaistītie līmeņi ir sajaukti. Augstās frekvences pārejām (Attēli 19c un 20c) aprēķinātie signāli ar šķērsvirziena magnētisko lauku un bez tā neuzrādīja ievērojamu atšķirību.



Att. 21: Eksperimentāli izmērītie (melni punkti) un simulētie (sarkani līknes) ODMR signāli pie GSLAC (1024 G) dažādiem leņķiem starp magnētisko lauku un NV asi.

Tika veikts vēl viens mērījumu kopums, lai novērtētu, kā mainās ODMR signāla forma attiecībā pret leņķi starp magnētisko lauku un NV centra asi. Šajā eksperimentā tika izmantots paraugs ar slāpekļa koncentrāciju 5–20 ppm. Eksperimentos leņķis starp magnētisko lauku un kristālu tika mainīts, pielāgojot parauga turētāja orientāciju attiecībā pret magnētisko lauku. Leņķis starp magnētisko lauku un NV asi tika noteikts, fitējot ODMR signālu. Attēlā 21 parādīta ODMR signāla atkarība no eksperimentāli izmērītā magnētiskā lauka leņķa GSLAC punktā mikroviļņu pārejām starp pamatstāvokļa $m_S = 0$ un $m_S = -1$ līmeņiem. Fitēšanas procedūra ļāva noteikt magnētiskā lauka leņķi ar precizitāti 0.02° . Attēlā 21a parādīts ODMR signāls eksperimentāli vislabāk sasniegtajai NV centra orientācijai attiecībā uz ārējā magnētiskā lauka virzienu, kas tika noteikts pēc fitēšanas procedūras un atbilst 0.11° . Leņķa palielināšana starp NV asi un ārējā magnētiskā lauka virzienu izraisa ODMR struktūras pārveidošanos divās piķu grupās, kas izskaidrojams ar $|m_S = 0\rangle$ un $|m_S = -1\rangle$ supersikstruktūras līmeņu sajaukšanos (Attēls 11b), kas GSLAC punktā atrodas enerģētiski tuvu viens otram. Leņķu vērtībām no 0.21° līdz 0.46° ODMR signālā var redzēt divas izšķirtas piķu grupas (Attēls 21b–d).



Att. 22: ODMR signāli ar ^{13}C mijiedarbību pārejām (a) $|m_s = 0\rangle \rightarrow |m_s = -1\rangle$, (b) $|m_s = 0\rangle \rightarrow |m_s = +1\rangle$. Aprēķinā ir pieņemts, ka tiek polarizēti gan ^{14}N , gan ^{13}C kodola spini.

3.6.4 ODMR signāli ar ^{13}C mijiedarbību

Attēlā 22 parādīti aprēķinātie ODMR signāli $|m_s = 0\rangle \rightarrow |m_s = -1\rangle$ (Attēls 22a) un $|m_s = 0\rangle \rightarrow |m_s = +1\rangle$ (Attēls 22b) pāreju kopumam, ņemot vērā ^{13}C kodolu spinu mijiedarbību. Katra līkne Attēlā 22 tika aprēķināta, izmantojot supersīkstruktūras tenzoru katrai ^{13}C saimei, izmantojot metodi, kas aprakstīta nodaļā 3.3. Katras līknes amplitūdai tika pielietots reizinājums $P(^{13}\text{C family})$, lai ņemtu vērā varbūtību ^{13}C atrasties noteiktā režģa pozīcijā. Lai labāk izšķirtu līknes, kas nāk no dažādām ^{13}C režģa saimēm, aprēķinos gan ^{14}N , gan ^{13}C kodola spina polarizācija bija 100%. ^{13}C kodola spina mijiedarbības ietekme skaidri redzama pāreju kopumam $|m_s = 0\rangle \rightarrow |m_s = +1\rangle$ kā pīķis pa labi no galvenā pīķa. Šis pīķis atbilst ^{13}C kodola spinam, kas aizņem režģa pozīcijas “A” un “B” (Attēls 12). Šo ^{13}C kodola spina supersīkstruktūras mijiedarbības stiprums ir attiecīgi 13.5 MHz un 12.8 MHz. Aprēķinātajos signālos nav izšķirti ^{13}C kodola spini ar supersīkstruktūras mijiedarbību, kas mazāka par 10 MHz.

3.7 Secinājumi

Šajā nodaļā tika pētītas mikroviļņu izraisītas pārejas starp NV centra pamatstāvokļa supersīkstruktūras līmeņiem, modeļējot optiski detektējamus magnētiskās rezonanses signālus. Modelis apraksta ODMR signālus pie magnētiskā lauka vērtībām pamatstāvokļa līmeņu antikrustošānās tuvumā, kur supersīkstruktūras līmeņi ir sajaukti. Mēs analizējam ODMR signāla atkarību no kodola spina polarizācijas, relaksācijas laika un leņķa starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra asi. Modelī tika iekļautas arī tuvumā esošo ^{13}C kodolu spinu mijiedarbība.

Eksperimentāli izmērīto datu salāgošana ar aprēķinātajiem signāliem tika veikta trim dimanta paraugiem ar slāpekļa koncentrāciju 1 ppm, 200 ppm un 5–20 ppm, ļaujot noteikt tādus parametrus kā kodola spina polarizācija un magnētiskā lauka leņķis.

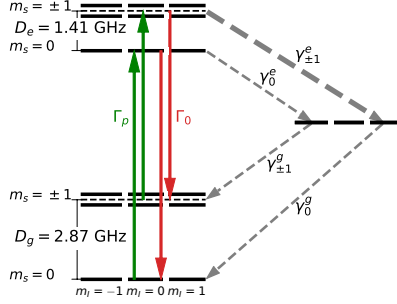
Metode kodola spina polarizācijas noteikšanai sajauktu stāvokļu gadījumā tiek izmantota arī 4. nodaļā, lai no eksperimentālajiem datiem iegūtu kodola spina polarizāciju.

4 Dinamiskā ^{14}N kodola spina polarizācija slāpekļa - vakanču centros dimanta kristālā

NV centri tiek izmantoti kā sensori un zondes, un to jutību iespējams palielināt, polarizējot apkārtējo kodolu spinus [47]. Šo procesu sauc par hiperpolarizāciju jeb dinamisko kodola spina polarizāciju. Augsta kodola spina polarizācija līdz šim ir sasniegta ierosinātā stāvokļa līmeņu antikrustošānās (ESLAC) tuvumā magnētiskajā laukā ap 512 G. Pētījumi ir veikti atsevišķiem ^{15}N kodola spiniem [48, 49], atsevišķiem ^{14}N un ^{15}N spiniem, kā arī ^{14}N un ^{13}C spinu ansambļiem [32, 50]. Supersīkstruktūras mijiedarbība rada papildus stāvokļus, kas ir stipri sajaukti līmeņu antikrustošānās tuvumā. Iepriekš eksperimentālie signāli, kuros tika mērīta kodola spina polarizācija, ir veiksmīgi aprakstīti ar modeļiem, kuru pamatā ir blīvuma matricas [32, 49, 50] pamatvienādojums, apvienojumā ar Lindblada operatoru [51], kā arī pat vienkāršotie ātruma vienādojumi [48]. Kodola spina polarizācija ir ļoti jutīga pret jebkurām magnētiskā lauka leņķiskajām novirzēm no NV centra ass [48], ko ir svarīgi ņemt vērā praktiskos pielietojumos. Šī īpašība var būt noderīga arī dimanta kristāla noregulēšanai attiecībā pret ārējā magnētiskā lauka virzienu. Kodola spina polarizācija pamatstāvokļa līmeņu krustošānās (GSLAC - *ground-state level anticrossing*) magnētiskā lauka reģionā ir daudz mazāk pētīta. Ir modeļi, kas paredz, ka ^{15}N gadījumā polarizācijai vajadzētu samazināties, magnētiskajam laukam palielinoties no ESLAC līdz GSLAC, un pie GSLAC polarizācija palielinās, veidojot šaurāku piķi [49].

NV centra elektrona spinu var polarizēt, izmantojot optisko pumpēšanu, un elektronu spins var palikt polarizēts ilgu laiku [19]. Polarizācija var tikt pārnesta no elektronu spina uz kodola spinu caur dinamisko kodola spina polarizāciju. Kodola spina relaksācijas laiks ir vēl ilgāks par elektrona spina relaksācijas laiku. Tas ļauj vēl efektīvāk izmantot polarizētos kodola spinus.

Šajā sadaļā mēs aprakstām modeli, kas izstrādāts, pamatojoties uz Liuvila vienādojumu ar Lindblada operatoru, lai aprēķinātu kodola spina polarizāciju plašā magnētiskā lauka diapazonā, ieskaitot gan ESLAC, gan GSLAC magnetiskā lauka reģionus. Mēs aprēķinām kodola spina polarizācijas atkarību no tādiem parametriem kā leņķis starp ārējā magnētiskā lauka virzienu un NV centra asi, absorbcijas ātrumu, šķērsvirziena deformācija spriegumu un starpsistēmas šķērsošanas relaksācijas ātrumu. Pēc tam aprēķinu rezultāti tiek salīdzināti ar eksperimentiem, kas iegūti Latvijas Universitātes Lāzeru centrā. Eksperimentus veica Reinis Lazda un Andris Bērziņš, un tie nav promocijas darba sastāvdaļa. Tomēr ekspe-



Att. 23: NV centra līmeņu shēma, kas izmantota blīvuma matricas modelī. Katrs no elektronu spina magnētiskajiem apakšlīmeņiem ir sadalīts trīs supersikstruktūras līmeņos, kas veido 21 līmeni.

rimentālo datu salāgošana tika veikta, izmantojot nodaļā 3.3 aprakstīto procedūru, tāpēc datu apstrāde ir iekļauta promocijas darbā.

Rezultāti parāda, ka kodola spina polarizācija ir jutīga pret šķērsvirziena deformācijas spriegumu un magnētiskā lauka leņķi līmeņu krustošanās punktos. Tā kā pamatstāvokļa supersikstruktūras mijiedarbība ir vājāka par ierosinātā stāvokļa supersikstruktūras mijiedarbību [32, 52, 53], kodola spina polarizācija ir īpaši jutīga pret šiem parametriem tieši pamatstāvokļa līmeņu krustošanās tuvumā. Šīs nodaļas rezultāti ir publicēti [46].

4.1 Lindblada vienādojumu modelis

Skaitliskajā modelī tiek ņemts vērā gan pamatstāvoklis 3A_2 , gan ierosinātais stāvoklis 3E ar ${}^{14}\text{N}$ kodola spinu $I = 1$. Sistēma tiek aprakstīta, izmantojot blīvuma operatoru ρ blīvuma matricas formā ar dimensiju 21, kas sastāv no deviņiem līmeņiem pamatstāvoklī, deviņiem ierosinātā stāvoklī un trīs singleta stāvoklī (Attēls 23). Pamata un ierosinātā stāvokļa deviņi līmeņi sastāv no trim magnētiskiem apakšlīmeņiem, katrs sadalīts trīs supersikstruktūras līmeņos, un singleta līmenis sastāv no trim supersikstruktūras līmeņiem.

Blīvuma matricu tiek aprēķināta, izmantojot Liuvila vienādojuma (1) līdzsvara stāvokļa risinājumu ar relaksāciju, ko apraksta Lindbladas operators [51]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \rho \right] + \hat{L} \rho = 0, \quad (36)$$

kur \hat{H} ir pamata un ierosinātā stāvokļa Hamiltoniāns. (15). Lindblada

superoperators \hat{L} [54] raksturo NV centra elektrona spina un ^{14}N kodola spina depopulācijas un dekoherences procesus:

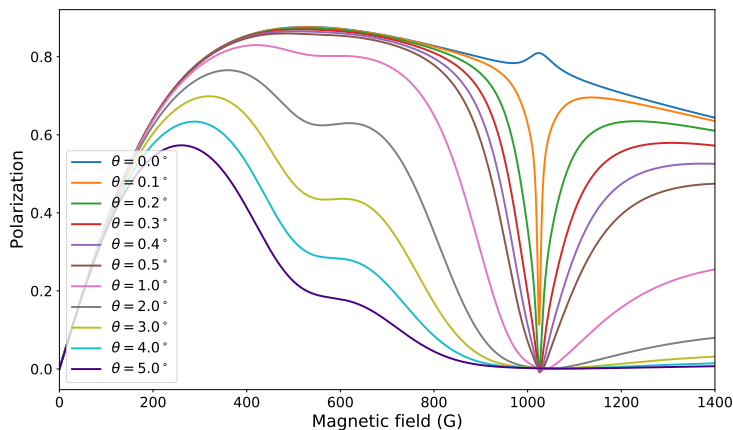
$$\hat{L}\rho = \sum_k \Gamma_k \left(\hat{L}_k \rho \hat{L}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k, \rho \} \right), \quad (37)$$

kur indeksi k raksturo katru no relaksācijas procesiem un ir izsakāmi kā $k \in \{(g_{m_S} \rightarrow e_{m_S}), (e_{m_S} \rightarrow g_{m_S}), (e_{m_S} \rightarrow s), (s \rightarrow g_{m_S}), (g_{m_S} \rightarrow g_{m'_S}), (e_{m_S} \rightarrow e_{m'_S}), (g_{m_I} \rightarrow g_{m'_I}), (e_{m_I} \rightarrow e_{m'_I}), (g_{m_S}, z_{\pm 10}), (e_{m_S}, z_{\pm 10}), (g_{m_I}, z_{\pm 10}), (e_{m_I}, z_{\pm 10})\}$, kur g, e un s atbilst attiecīgi pamata, ierosinātajam un singleta stāvoklim. Indeksi $m_S, m'_S, m_I, m'_I = +1, 0, -1$ apraksta attiecīgi elektrona un kodola spina projekciju. Un $z_{\pm 10}$ apraksta Pauli- z operatoru ($m_{S(I)} = \pm 1, m'_{S(I)} = 0$) apakštelpā un atbilst šo stāvokļu dekoherencei. Γ_k ir relaksācijas ātrumi, un operatori \hat{L}_k raksturo stāvokļu depopulāciju un dekoherenci. Kvantu lēciena operators $\hat{L}_k = |i\rangle\langle j|$ apraksta pārejas starp stāvokļiem $|i\rangle$ and $|j\rangle$, ņemot vērā depopulāciju. Šis operators apraksta tādus procesus kā pārejas starp tripleta ierosināto un pamatstāvokli (fluorescence ar ātrumu Γ_0 un pumpēšanas ar ātrumu Γ_p), neradiatīvas pārejas (starpstāvēšanas šķērsošana starp tripleta un singleta stāvokļiem) ar ātrumiem γ_0^e un $\gamma_{\pm 1}^e$ no tripleta ierosinātā stāvokļa uz singleta stāvokli un ātrumiem γ_0^g un $\gamma_{\pm 1}^g$ no singleta stāvokļa uz tripleta pamatstāvokli. Šis operators apraksta arī procesus, kas saistīti ar relaksācijas laiku T_1 (populācijas pārnese starp elektronu un kodola spina magnētiskajiem apakšlīmeņiem ierosinātajā un pamatstāvoklī). Operators $\hat{L}_k = |i\rangle\langle i| - |j\rangle\langle j|$ apraksta ar T_2 saistītos procesus elektrona un kodola spiniem pamata un ierosinātajā stāvoklī, un tas raksturo stāvokļu $|i\rangle$ un $|j\rangle$ dekoherenci.

Kodola spina polarizāciju elektrona spina magnētiskajā apakšlīmeņī $m_S = 0$ aprēķina no blīvuma matricas līdzsvara stāvokļa risinājuma kā

$$P_{th} = \frac{\rho_{01} - \rho_{0-1}}{\rho_{01} + \rho_{00} + \rho_{0-1}}, \quad (38)$$

kur $\rho_{m_S m_I} = \langle g, m_S, m_I | \rho_{SS} | g, m_S, m_I \rangle$ ir pamatstāvokļa bāzes stāvokļa $|g, m_S, m_I\rangle$ populācija. Lindblada vienādojuma modeļa aprēķini ļauj mums izpētīt dažādu sistēmas parametru ietekmi uz kodola spina polarizāciju. Lineāro vienādojumu sistēmas risināšanai tika izmantota Python QuTip bibliotēka [55].



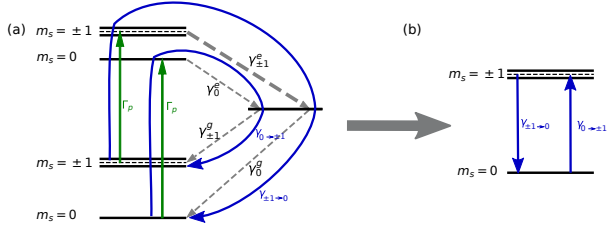
Att. 24: Kodola spina polarizācijas aprēķins dažādiem magnētiskā lauka leņķiem. Magnētiskā lauka leņķis diapazonā $\theta = 0^\circ - 0.5^\circ$ ar soli 0.1° parāda straujas izmaiņas kodola spina polarizācijā GSLAC tuvumā. Magnētiskā lauka leņķis diapazonā $\theta = 1^\circ - 5^\circ$ ar soli 1° parāda lēnākas izmaiņas ESLAC tuvumā.

4.2 Rezultāti

4.2.1 Kodola spina polarizācijas atkarība no magnētiskā lauka leņķa

Viens no aprēķinos izpētītajiem parametriem bija leņķis starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra galveno asi. Ja NV centra ass sakrīt ar magnētisko lauku virzienu, iespējams panākt augstu kodola spina polarizāciju. Tomēr precīzu virziena sakritību ne vienmēr ir viegli panākt tādu faktoru dēļ kā neviendabīgs magnētiskais lauks. Tāpēc ir svarīgi pārbaudīt leņķa ietekmi starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra galveno asi. Kā redzams Attēlā 24, magnētiskā lauka leņķis ietekmē kodola spina polarizāciju gan ierosinātā stāvokļa, gan pamatstāvokļa līmeņu krustošanās magnētiskā lauka apgabalos. Šķērsvirziena magnētiskais lauks ievieš papildu mijiedarbību starp supersīkstruktūras līmeņiem, kā rezultātā notiek jaukšanās starp vairākiem supersīkstruktūras līmeņiem, kas spēcīgi maina polarizācijas procesu.

Ja rūpīgāk aplūko GSLAC reģionu, var redzēt, ka kodola spina polarizācija ir $\sim 85\%$ magnētiskā lauka leņķim $\theta = 0^\circ$, bet ievērojami samazinās



Att. 25: Pārejas ātruma ietekmes uz elektronu spina polarizāciju vizualizācija.

pie $\theta = 0.1^\circ$ un sasniedz gandrīz 0% pie $\theta = 0.2^\circ$. Ierosinātajā stāvoklī ir daudz spēcīgāka supersīkstruktūras mijiedarbība [32], tāpēc ESLAC reģions nav tik jutīgs pret tik maziem leņķiem. ESLAC tuvumā pamanāms ievērojams kritums magnētiskā lauka leņķim $\theta = 1^\circ$. Kad magnētiskā lauka leņķis tiek palielināts vēl vairāk, kodola spina polarizācija samazinās un maksimums tiek novirzīts uz zemākām magnētiskā lauka vērtībām.

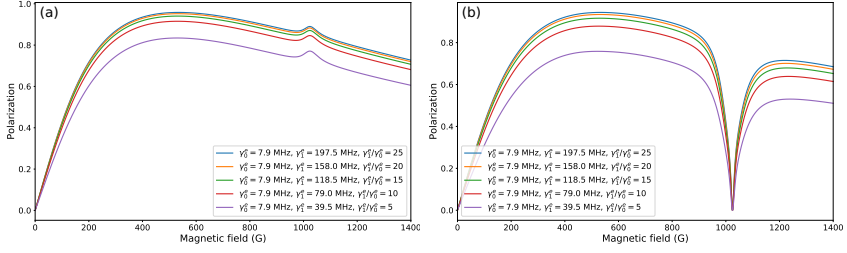
4.2.2 Kodola spina polarizācijas atkarība no pārejas ātrumiem

Elektronu spina polarizācija ir atkarīga no starpsistēmas pārejas ātrumiem γ_0^e , γ_{\pm}^e , γ_0^g un γ_{\pm}^g . Šie ātrumi nosaka populācijas pārnese starp magnētiskajiem apakšlīmeņiem $m_S = 0$ un $m_S = \pm 1$. Šo procesu var izskaidrot, aplūkojot pārejas ātrumus, kas parādīti Attēlā 25b. Elektronu spina polarizāciju nosaka pārejas ātrums starp pamatstāvokļa magnētiskajiem apakšlīmeņiem $m_S = \pm 1 \rightarrow m_S = 0$ un $m_S = 0 \rightarrow m_S = \pm 1$, kuri ir apzīmēti attiecīgi ar $\gamma_{\pm 1 \rightarrow 0}$ un $\gamma_{0 \rightarrow \pm 1}$. Šos ātrumus var izteikt (Attēls 25a) kā

$$\begin{aligned}\gamma_{\pm 1 \rightarrow 0} &= \Gamma_p \cdot \gamma_{\pm 1}^e \cdot \gamma_0^g \\ \gamma_{0 \rightarrow \pm 1} &= \Gamma_p \cdot \gamma_0^e \cdot \gamma_{\pm 1}^g\end{aligned}\quad (39)$$

Tā kā pārejas ātrumi γ_0^e , γ_{\pm}^e , γ_0^g un γ_{\pm}^g nav precīzi zināmi un var atšķirties dažādiem dimanta paraugiem, ir svarīgi izpētīt ietekmi attiecībai starp pārejas ātrumiem no pamatstāvokļa magnētiskā apakšlīmeņa $m_S = \pm 1$ uz pamatstāvokļa magnētiskajam apakšlīmeņim $m_S = 0$ un no pamatstāvokļa magnētiskā apakšlīmeņa $m_S = 0$ uz pamatstāvokļa magnētisko apakšlīmeņi $m_S = \pm 1$ uz kodola spina polarizāciju. Šo pārejas ātrumu attiecību var izteikt kā

$$\frac{\gamma_{\pm 1 \rightarrow 0}}{\gamma_{0 \rightarrow \pm 1}} = \frac{\Gamma_p \cdot \gamma_{\pm 1}^e \cdot \gamma_0^g}{\Gamma_p \cdot \gamma_0^e \cdot \gamma_{\pm 1}^g} = \frac{\gamma_{\pm 1}^e \cdot \gamma_0^g}{\gamma_0^e \cdot \gamma_{\pm 1}^g}.\quad (40)$$

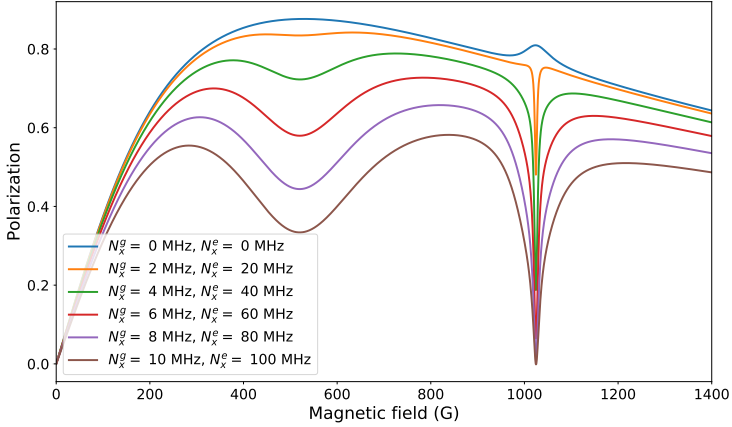


Att. 26: Teorētiskā kodola spina polarizācija dažādām pārejas ātrumu attiecībām $\frac{\gamma_{\pm 1}^e}{\gamma_0^e}$ ar leņķi starp NV centra asi un magnētisko lauku: (a) $\theta = 0.0^\circ$, (b) $\theta = 0.2^\circ$. Pumpēšanas ātrums skaitliskajos aprēķinos bija $\Gamma_p = 5$ MHz. Pārejas ātrumi no singleta stāvokļa uz pamatstāvokļa stāvokļa apakšlīmeni $m_S = 0$ un no singleta stāvokļa uz pamatstāvokļa apakšlīmeni bija $\gamma_0^g = 1$ MHz un $\gamma_{\pm}^g = 1$ MHz.

Tā kā pārejas ātrumi no singleta stāvokļa uz pamatstāvokļa apakšlīmeni $m_S = 0$ un no singleta stāvokļa uz pamatstāvokļa apakšlīmeni $m_S = \pm 1$ parasti ir aptuveni 1 MHz un to attiecība $\frac{\gamma_0^g}{\gamma_{\pm}^g}$ parasti ir diapazonā 1.1 – 2.0 [32, 56], abiem šiem pārejas ātrumiem tika iestatīta vērtība $\gamma_0^g = 1$ MHz and $\gamma_{\pm}^g = 1$ MHz, veicot aprēķinus Attēlā 26. Pēc tam tika veikti aprēķini dažādām pārejām no ierosinātā stāvokļa uz singleta stāvoklim $\frac{\gamma_{\pm 1}^e}{\gamma_0^e}$, kas ir ekvivalents attiecībai $\frac{\gamma_{\pm 1 \rightarrow 0}}{\gamma_{0 \rightarrow \pm 1}}$ (40). Attēlā 26 parādīta pārejas ātrumu attiecības no ierosinātā stāvokļa uz singleta stāvokli $\frac{\gamma_{\pm 1}^e}{\gamma_0^e}$ atkarība no kodola spina polarizācijas. Palielinot attiecību, palielinās elektronu spina polarizācija (Attēls 25b) un līdz ar to tiek palielināta kodola spina polarizācija. Pārejas ātrumu attiecība ietekmē kodola spina polarizāciju proporcionāli visā magnētiskā lauka diapazonā. Attēlā 26 parādīta teorētiskā kodola spina polarizācija dažādām pārejas ātruma attiecībām $\frac{\gamma_{\pm 1}^e}{\gamma_0^e}$ ar leņķi starp NV centra asi un magnētisko lauku $\theta = 0.0^\circ$ (Attēls 26a) un $\theta = 0.2^\circ$ (Attēls 26b).

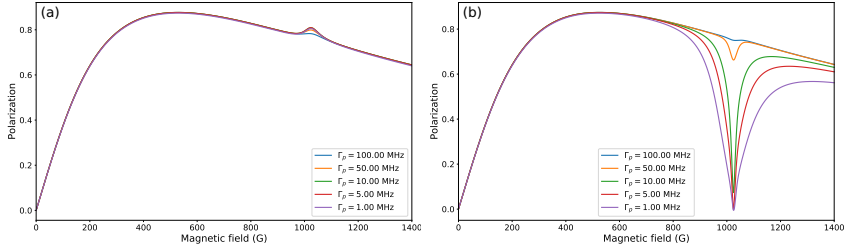
4.2.3 Kodola spina polarizācijas atkarība no šķērseniskā deformācijas sprieguma

Deformācijas sprieguma radīta spinu mijiedarbība [31, 33–36] var radīt līdzīgu efektu kā šķērseniskais magnētiskais lauks. Šķērseniskā deformācijas



Att. 27: Teorētiskā kodola spina polarizācija dažādām šķērseniskā deformācijas sprieguma izraisītām mijiedarbības vērtībām. Pumpēšanas ātrums skaitliskajos aprēķinos bija $\Gamma_p = 5$ MHz.

sprieguma mijiedarbības komponentes N_x un N_y (20) saista magnētiskos apakšlīmeņus $m_s = 0$ un $m_s = \pm 1$. Tā kā NV centram piemīt C_{3v} simetrija, mēs varam izvēlēties tādu atskaites sistēmu, kurā tikai elements N_x ir nenulles. Līmeņu krustošanās punktos, kur enerģijas starpība starp līmeņiem $m_s = 0$ un $m_s = -1$ ir maza, deformācijas sprieguma mijiedarbības komponente N_x rada līdzīgu līmeņu sajaukšanos kā šķērseniskā magnētiskā lauka gadījumā. Šķērseniskās deformācijas sprieguma mijiedarbības loceklis N_x ietekmē kodola spina polarizāciju gan ESLAC, gan GSLAC tuvumā, kā redzams Attēlā 27. Deformācijas sprieguma izraisītā mijiedarbība starp spina stāvokļiem pamatstāvoklī parasti ir dažu megahercu diapazonā, savukārt ierosinātajā stāvoklī ir dažu desmitu megahercu lielumā [37, 57]. Lai aprēķinātu deformācijas sprieguma ietekmi uz kodola spina polarizāciju līmeņu krustošanās tuvumā, ierosinātā stāvokļa deformācijas sprieguma mijiedarbība tika izvēlēta kā $N_x^e = 10N_x^g$, lai ņemtu vērā dažādu deformācijas sprieguma izraisīto mijiedarbības stipruma kārtu pamata un ierosinātajā stāvoklī. Pat neliels šķērseniskais deformācijas spriegums var ievērojami samazināt kodola spina polarizāciju GSLAC un ESLAC reģionos.



Att. 28: Teorētiskā kodola spina polarizācija dažādiem pumpēšanas ātrumiem ar leņķi starp NV centra asi un magnētisko lauku: (a) $\theta = 0.0^\circ$, (b) $\theta = 0.2^\circ$.

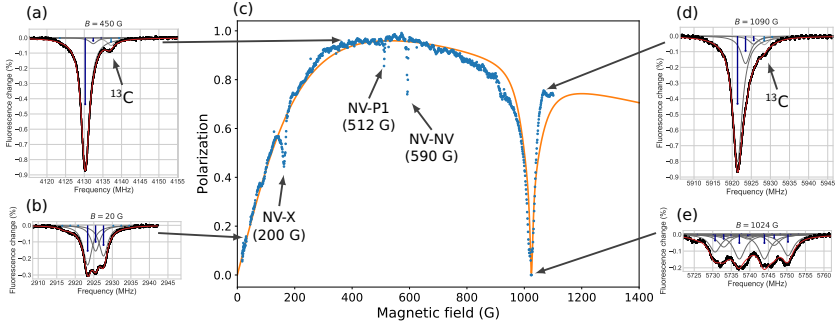
4.2.4 Kodola spina polarizācijas atkarība no optiskās pumpēšanas ātruma

Ja magnētiskais lauks ir vērsts precīzi NV centra ass virzienā, optiskās pumpēšanas ātruma Γ_p , kas raksturo pumpējošā lāzera jaudu, izmaiņas īpaši neietekmē kodola spina polarizāciju (Attēls 28a). Tomēr, ja ir neliela magnētiskā lauka virziena novirze no NV centra ass, kodola spina polarizācija pamatstāvokļa līmeņu krustošanās reģionā ir jutīga pret optiskās pumpēšanas ātrumu. Aprēķināto kodola spina polarizāciju dažādiem pumpēšanas ātrumiem ar leņķi starp magnētisko lauku un NV centra asi $\theta = 0.2^\circ$ var redzēt Attēlā 28b.

4.2.5 Modeļa pārbaude, salīdzinot ar eksperimentālajiem datiem

Eksperiments tika veikts Latvijas Universitātes Lāzeru centrā Reiņa Lazdas un Andra Bērziņa izpildījumā. Eksperimentālās iekārta ir aprakstīta disertācijas pielikumā.

Kodola spina polarizāciju tika noteikta no ODMR signāliem pārējām $|m_s = 0\rangle \rightarrow |m_s = +1\rangle$ (Attēls 29a,b,d,e), salāgojot eksperimentālos signālus (melnus punktus) ar modelētu ODMR līkni (sarkanu līkni). ODMR signālu modelis ir aprakstīts nodaļā 3.3. Modelētā līkne ir Lorencas līkņu summa, kuru centrālās frekvences ir supersīkstruktūras pārejas frekvences ω_i (32). Rezonanses pārejas amplitūdas t_i (30) ir izteiktas kā pārejas varbūtību p_i un supersīkstruktūras bāzes stāvokļu relatīvo populāciju $N_i(m_I)$ reizinājums. Supersīkstruktūras līmeņu pārejas varbūtības p_i un pārejas frekvences ω_i tika aprēķinātas no pamatstāvokļa Hamiltoniāna (15) īpašfunkcijām un īpašvērtībām, ņemot vērā elektronu un kodolu spinu magnētiskā dipola pāreju izvēles likumus $\Delta m_S = \pm 1$ un $\Delta m_I = 0$

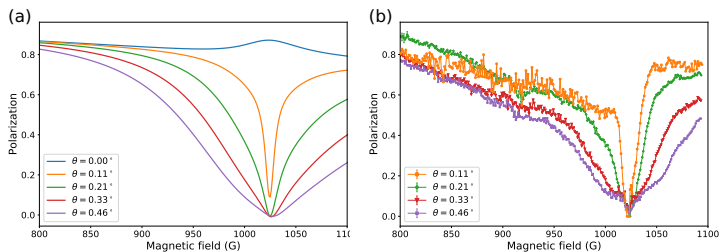


Att. 29: (a), (b), (d), (e): Eksperimentālie (melnie punkti) un fitētie (sarkanās līknes) ODMR signāli konkrētām magnētiskā lauka vērtībām. (c): Eksperimentālā (zilie punkti) un teorētiskā (oranžā līkne) kodola spina polarizācija. Optiskās pumpēšanas ātrums aprēķinots bija $\Gamma_p = 5$ MHz. Magnētiskā lauka leņķis $\theta = 0.2^\circ$ tika noteikts, veicot ODMR līkņu fitēšanu.

(skatīt nodaļu 3.3). Eksperimentālie signāli tika salāgoti, izmantojot metodi, kas aprakstīta nodaļā 3.3, ļaujot noteikt bāzes stāvokļu relatīvās populācijas un aprēķināt eksperimentālo kodola spina polarizāciju (31), kā arī noteikt leņķi θ starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra asi (19).

ODMR signālos, kas uzņemti tālu no GSLAC, iespējams novērot trīs supersīkstruktūras pārejas, tā ka katrs no pamatstāvokļa bāzes stāvokļiem m_I ir iesaistīts vienā pārejā. Notiekot līmeņu krustošanai, pamatstāvokļa magnētiskie apakšlīmeņi $|m_S = 0\rangle$ un $|m_S = -1\rangle$ tiek sajaukti, kā rezultātā ir novērojamas vairāk kā trīs supersīkstruktūras pāreju komponentes (Attēls 29e). Līdz ar to, veicos signālu salāgošanu, nepieciešams ņemt vērā stāvokļu sajaukšanos. Bāzes stāvokļu relatīvo populāciju iegūšana no eksperimentālajiem signāliem ļāva mums tiešā veidā salīdzināt eksperimentāli noteikto kodola spina polarizāciju (31) ar teorētiski aprēķināto kodola spina polarizāciju (38).

Kā redzams Attēlā 29b, pie zemām magnētiskā lauka vērtībām (ap 20 G) triju supersīkstruktūras pāreju amplitūdas ir gandrīz vienādas. Tas norāda uz zemu ^{14}N kodola spina polarizāciju. Magnētiskajā laukā netālu no ESLAC (Attēls 29a) ir viena dominējošā pāreja, un ODMR signāla kontrasts ir palielinājies apmēram trīs reizes. To var izskaidrot ar populācijas uzkrāšanos stāvoklī $m_I = +1$, kas noved pie augstas ^{14}N kodola spina polarizācijas $-96 \pm 2\%$. ODMR signāls GSLAC punktā (Attēls 29e) tika izmantots eksperimentālā magnētiskā lauka leņķa noteikšanai, iegūstot



Att. 30: (a) Aprēķinātā un (b) eksperimentāli noteiktā kodola spina polarizācija dažādiem magnētiskā lauka leņķiem. Optiskās pumpēšanas ātrums aprēķinos bija $\Gamma_p = 5$ MHz.

vērtību $\theta = 0.2^\circ$.

Tā kā eksperimentā izmantotajam dimanta kristālam bija dabisks oglekļa izotopu sadalījums, 1.1% oglekļa atomu ir ^{13}C izotopi (nodaļa 3.4). ^{13}C kodola spina ietekme ir redzama ODMR signālā kā papildu pīķis blakus galvenajam pīķim (Attēls 29a).

Eksperiments tika veikts magnētiskā lauka diapazonā no 0 līdz 1100 G, iekļaujot gan ESLAC, gan GSLAC reģionus. Katrs zilais punkts Attēlā 29c atbilst ODMR signāla mērījumam, kas pēc tam tika salāgots, izmantojot modeli, kas aprakstīts sadaļā 3.3, lai aprēķinātu eksperimentālo kodola spina polarizāciju. Pie 512 G var novērot polarizācijas kritumu, kas ir saistīts ar NV centru mijiedarbību ar slāpekli (P1 centrs) kristāla režģī un starp-relaksāciju starp NV un P1 centriem [58–60]. Ap 590 G notiek polarizācijas kritums, tā iemesla dēļ, ka NV centra, kurš vērsts magnētiskā lauka \mathbf{B} virzienā, pamatstāvokļa enerģija sakrīt ar NV centru enerģiju pārējās trīs iespējamās virzienos dimanta kristālā [61]. Polarizācijas kritums ap 200 G varētu būt saistīts ar NV centru starp-relaksāciju ar citiem nezināmiem paramagnētisko defektu centriem kristālā [61–63].

Lai aprēķinātu Attēla 29c redzamo oranžo līkni, T_1 un T_2 laiki, kā arī pārejas ātrumi Γ_0 tika ņemti no [56, 64, 65], bet starpsistēmas pārejas ātrumi tika pielāgoti, lai tie atbilstu tipiskai eksperimentos novērotai elektronu spina polarizācija [66]. Kā paskaidrots nodaļā 4.2.2, attiecība pārejas ātrumiem no singleta stāvokļa uz tripleta pamatstāvokli bija $\frac{\gamma_0^g}{\gamma_{\pm}^g} = 1$, un attiecība pārejas ātrumiem no ierosinātā stāvokļa uz singleta stāvokli $\frac{\gamma_{\pm}^e}{\gamma_0^e}$ tika pielāgota. Lai panāktu vislabāko atbilstību eksperimentālajiem

datiem, aprēķinos izmanota attiecība $\frac{\gamma_{\pm 1}^e}{\gamma_0^e} = 20$. Tas ir tuvu vērtībai, kas izmantota [50], tomēr nesaskan ar pārejas ātruma vērtībām no [56]. Optiskās pumpēšanas ātrums skaitliskajos aprēķinos bija $\Gamma_p = 5$ MHz. Magnētiskā lauka leņķis teorētiskās līknes aprēķiniem bija $\theta = 0.2^\circ$.

Kodola spina polarizācijas atkarība no magnētiskā lauka leņķa tika mērīta GSLAC tuvumā. Eksperimentālajiem datiem ir tāda pati tendence kā teorētiski prognozētajām līknēm, parādot, ka pat neliels magnētiskā lauka leņķis spēcīgi ietekmē kodola spina polarizāciju pie GSLAC (Attēls 30).

4.3 Secinājumi

Dinamiskā kodola spina polarizācija ir efekts, ko var novērot NV centros. Tas ir arī svarīgs efekts dažādiem pielietojumiem. Piemēram, kodola spina polarizācija ievērojami palielina kodolu paramagnētiskās rezonanses metožu jutīgumu, un tai ir potenciāls tikt izmantotai arī kvantu tehnoloģijās [67]. Nepieciešamība palielināt jutību radīja motivāciju detalizēti izpētīt kodola spina polarizāciju. Lai to izdarītu, mēs izstrādājām modeli, kas balstīts uz Liuvila vienādojumiem ar Lindblada operatoru, kas apraksta kodolu spina polarizāciju plašā magnētiskā lauka diapazonā, ieskaitot gan pamata, gan ierosinātā stāvokļu supersikstruktūras mijiedarbību. Mēs pētījām leņķa starp magnētiskā lauka virzienu un NV centra galveno asi, šķērseniskā deformācijas sprieguma, pārejas ātrumu un optiskās pumpēšanas ātruma ietekmi uz kodola spina polarizāciju. Līmeņa sajaukšanās pamatstāvoklī supersikstruktūras mijiedarbības dēļ ir vājāka nekā ierosinātajā stāvoklī, kā rezultātā ārējo parametru jutīgums pamatstāvokļa līmeņu krustošanās tuvumā ir lielāks nekā ierosinātā stāvokļa līmeņu krustošanās tuvumā. Gan aprēķini, gan eksperimentālie rezultāti parāda, ka pat neliels magnētiskā lauka leņķis $\sim 0.1^\circ$ gandrīz pilnībā iznīcina kodola spina polarizāciju pamatstāvokļa līmeņu krustošanās punktā, savukārt $\sim 1^\circ$ liels leņķis rada nelielu kritumu kodola polarizācijas līknē ierosinātā stāvokļa līmeņu krustošanās tuvumā (Attēls 24). Šķērseniskais deformācijas spriegums var izraisīt līdzīgu efektu kā magnētiskā lauka novirze no NV centra ass, jo tas sajauc tos pašus supersikstruktūras līmeņus kā magnētiskā lauka šķērseniskā komponente.

Aprēķinu rezultāti tika salīdzināti ar eksperimentālajiem rezultātiem, kas iegūti no optiski detektējamiem magnētiskās rezonanses signāliem, izmantojot salāgošanas procedūru, kas aprakstīta nodaļā 3.6.3. Tas ļāva vēlreiz apstiprināt mikroviļņu pāreju modeli plašā magnētiskā lau-

ka diapazonā un noteikt kodola spina polarizāciju no eksperimentālajiem signāliem. Pētījuma rezultāti sniedz ieskatu kodola spina polarizācijas noteikšanā, īpaši mazāk pētītajā pamatstāvokļa līmeņu krustošanās apgabalā. Rezultāti palīdz izprast kodola spina polarizācijas procesus, parādot magnētiskā lauka un deformācijas sprieguma ietekmi uz polarizāciju, kas varētu uzlabot NV centra pielietojumu efektivitāti.

5 Galvenie rezultāti

1. Tika pārbaudīts literatūrā publicētais teorētiskais modelis nelineārai magneto optiskajai polarizācijas plaknes rotācijai, kas balstīts uz izšķirtu un neizšķirtu supersīkstruktūru, un modelis tika adaptēts eksperimentālajiem apstākļiem, kādos tika mērīta polarizācijas plaknes rotācija rubīdija tvaikos ar zilās gaismas ierosmi.
 - Tika konstatēts, ka pamatstāvokļa repopulāciju spontānās relaksācijas dēļ var raksturot ar vienu parametru, kaskādes pārejas ātrumus caur starpstāvokļiem aizstājot ar vienu parametru tiešajai pārejai.
 - Modeļa parametru analīze parāda, ka nepieciešams veikt Rabi frekvences un caurlidošanas relaksācijas pielāgošanu, ņemot vērā stara profilu, lai aprakstītu eksperimentālos datus.
2. NV centra optiski detektējamu magnētiskās rezonanses signālu analīze pamatstāvokļa supersīkstruktūru līmeņa antikrustošānās tuvumā sniedz izpratni par supersīkstruktūru līmeņu sajaukšanos, NV centra elektrona un kodola spinu mijiedarbības dēļ un NV centra mijiedarbības ar ārējo magnētisko lauku dēļ.
 - Mikroviļņu lauka izraisīto pāreju starp elektronu supersīkstruktūras komponentēm varbūtības tiek ievērojami mainītas, supersīkstruktūras līmeņiem sajaucoties, kas noved pie sarežģītākiem optiski detektējamu magnētiskās rezonanses signāliem, kurus var modelēt, ņemot vērā līmeņu sajaukšanos.
 - Modelēto signālu analīze parāda, ka optiski detektējamu magnētiskās rezonanses signālu formu ietekmē slāpekļa kodola spina polarizācija, relaksācijas laiks T_2^* un magnētiskā lauka virziens attiecībā pret NV centra galveno asi.
3. Izmantojot skaitlisko modeli, kura pamatā ir Liuvila vienādojums ar Lindblada operatoru, tika parādīts, ka spēcīga ^{14}N kodola spina polarizācija var tikt novērota plašā magnētiskā lauka diapazonā, ieskaitot gan ierosinātā, gan pamatstāvokļa līmeņa antikrustošānās magnētiskā lauka reģionus.
 - Pat neliela magnētiskā lauka virziena izmaiņa attiecībā pret NV centra galveno asi gandrīz pilnībā iznīcina kodola spina polarizāciju pamatstāvokļa līmeņa antikrustošānās tuvumā.

- Šķērseniskais deformācijas spriegums arī var izraisīt līdzīgu efektu kā magnētiskā lauka virziena izmaiņa.

Literatūras saraksts

- [1] D. Budker and M. Romalis, “Optical magnetometry,” Nature Physics, vol. 3, no. 4, pp. 227–234, 2007.
- [2] S. Pustelny, M. Koczwar, L. Cincio, and W. Gawlik, “Tailoring quantum superpositions with linearly polarized amplitude-modulated light,” Phys. Rev. A, vol. 83, p. 43832, 4 2011.
- [3] T. Zigdon, a. D. Wilson-Gordon, S. Guttikonda, E. J. Bahr, O. Neitzke, S. M. Rochester, and D. Budker, “Nonlinear magneto-optical rotation in the presence of a radio-frequency field.,” Optics express, vol. 18, pp. 25494–508, 12 2010.
- [4] M. Auzinsh, D. Budker, and S. M. Rochester, “Light-induced polarization effects in atoms with partially resolved hyperfine structure and applications to absorption, fluorescence, and nonlinear magneto-optical rotation,” Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics, vol. 80, pp. 1–22, 11 2009.
- [5] M. Auzinsh, D. Budker, and S. M. Rochester, Optically Polarized Atoms: Understanding Light–Atom Interactions. Oxford University Press, 2010.
- [6] S. Pustelny, L. Busaite, M. Auzinsh, A. Akulshin, N. Leefer, and D. Budker, “Nonlinear magneto-optical rotation in rubidium vapor excited with blue light,” Physical Review A, vol. 92, no. 5, 2015.
- [7] J. Barrat and C. Cohen-Tannoudji, “Étude Du Pompage Optique Dans Le Formalisme De La Matrice Densité,” Journal de Physique et le Radium, vol. 22, no. 6, pp. 329–336, 1961.
- [8] M. Auzinsh, R. Ferber, F. Gahbauer, A. Jarmola, L. Kalvans, and A. Atvars, “Cascade coherence transfer and magneto-optical resonances at 455 nm excitation of cesium,” pp. 1–12, 2010.
- [9] S. J. Huard, “Polarized Light, Basic Concepts of,” in digital Encyclopedia of Applied Physics, American Cancer Society, 2004.
- [10] E. Pfleghaar, J. Wurster, S. I. Kanorsky, and A. Weis, “Time of flight effects in nonlinear magneto-optical spectroscopy,” Optics Communications, vol. 99, pp. 303–308, 6 1993.

- [11] D. Budker, D. Kimball, S. Rochester, V. Yashchuk, and M. Zolotarev, “Sensitive magnetometry based on nonlinear magneto-optical rotation,” Physical Review A, vol. 62, p. 043403, 9 2000.
- [12] J. H. N. Loubser and J. A. V. Wyk, “Electron spin resonance in the study of diamond,” Reports on Progress in Physics, vol. 41, pp. 1201–1248, 8 1978.
- [13] N. Reddy, N. Manson, and E. Krausz, “Two-laser spectral hole burning in a colour centre in diamond,” Journal of Luminescence, vol. 38, pp. 46–47, 12 1987.
- [14] D. A. Redman, S. Brown, R. H. Sands, and S. C. Rand, “Spin dynamics and electronic states of N- V centers in diamond by EPR and four-wave-mixing spectroscopy,” Physical Review Letters, vol. 67, pp. 3420–3423, 12 1991.
- [15] P. Delaney, J. C. Greer, and J. A. Larsson, “Spin-Polarization Mechanisms of the Nitrogen-Vacancy Center in Diamond,” Nano Letters, vol. 10, pp. 610–614, 2 2010.
- [16] L. Robledo, H. Bernien, T. V. D. Sar, and R. Hanson, “Spin dynamics in the optical cycle of single nitrogen-vacancy centres in diamond,” New Journal of Physics, vol. 13, p. 025013, 2 2011.
- [17] M. L. Goldman, M. W. Doherty, A. Sipahigil, N. Y. Yao, S. D. Bennett, N. B. Manson, A. Kubanek, and M. D. Lukin, “State-selective intersystem crossing in nitrogen-vacancy centers,” Physical Review B, vol. 91, p. 165201, 4 2015.
- [18] 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, p. 115202, 9 2009.
- [19] G. Balasubramanian, P. Neumann, D. Twitchen, M. Markham, R. Kolesov, N. Mizuochi, J. Isoya, J. Achard, J. Beck, J. Tissler, V. Jacques, P. R. Hemmer, F. Jelezko, and J. Wrachtrup, “Ultralong spin coherence time in isotopically engineered diamond,” Nature Materials, vol. 8, pp. 383–387, 5 2009.

- [20] J. D. A. Wood, D. A. Broadway, L. T. Hall, A. Stacey, D. A. Simpson, J.-P. Tetienne, and L. C. L. Hollenberg, “Wide-band nanoscale magnetic resonance spectroscopy using quantum relaxation of a single spin in diamond,” Physical Review B, vol. 94, p. 155402, 10 2016.
- [21] J. Smits, J. T. Damron, P. Kehayias, A. F. McDowell, N. Mosavian, I. Fescenko, N. Ristoff, A. Laraoui, A. Jarmola, and V. M. Acosta, “Two-dimensional nuclear magnetic resonance spectroscopy with a microfluidic diamond quantum sensor,” Science Advances, vol. 5, p. eaaw7895, 7 2019.
- [22] T. Wolf, P. Neumann, K. Nakamura, H. Sumiya, T. Ohshima, J. Isoya, and J. Wrachtrup, “Subpicotesla Diamond Magnetometry,” Physical Review X, vol. 5, p. 041001, 10 2015.
- [23] I. Fescenko, A. Jarmola, I. Savukov, P. Kehayias, J. Smits, J. Damron, N. Ristoff, N. Mosavian, and V. M. Acosta, “Diamond magnetometer enhanced by ferrite flux concentrators,” Physical Review Research, vol. 2, p. 023394, 6 2020.
- [24] Y. Schlüssel, T. Lenz, D. Rohner, Y. Bar-Haim, L. Bougas, D. Groswasser, M. Kieschnick, E. Rozenberg, L. Thiel, A. Waxman, J. Meijer, P. Maletinsky, D. Budker, and R. Folman, “Wide-Field Imaging of Superconductor Vortices with Electron Spins in Diamond,” Physical Review Applied, vol. 10, p. 034032, 9 2018.
- [25] D. R. Glenn, R. R. Fu, P. Kehayias, D. Le Sage, E. A. Lima, B. P. Weiss, and R. L. Walsworth, “Micrometer-scale magnetic imaging of geological samples using a quantum diamond microscope,” Geochemistry, Geophysics, Geosystems, vol. 18, pp. 3254–3267, 8 2017.
- [26] I. Fescenko, A. Laraoui, J. Smits, N. Mosavian, P. Kehayias, J. Seto, L. Bougas, A. Jarmola, and V. M. Acosta, “Diamond Magnetic Microscopy of Malarial Hemozoin Nanocrystals,” Physical Review Applied, vol. 11, p. 034029, 3 2019.
- [27] D. Le Sage, K. Arai, D. R. Glenn, S. J. DeVience, L. M. Pham, L. Rahn-Lee, M. D. Lukin, A. Yacoby, A. Komeili, and R. L. Walsworth, “Optical magnetic imaging of living cells,” Nature, vol. 496, pp. 486–489, 4 2013.

- [28] H. Clevenson, M. E. Trusheim, C. Teale, T. Schröder, D. Braje, and D. Englund, “Broadband magnetometry and temperature sensing with a light-trapping diamond waveguide,” Nature Physics, vol. 11, pp. 393–397, 5 2015.
- [29] A. Batalov, V. Jacques, F. Kaiser, P. Siyushev, P. Neumann, L. J. Rogers, R. L. McMurtrie, N. B. Manson, F. Jelezko, and J. Wrachtrup, “Low Temperature Studies of the Excited-State Structure of Negatively Charged Nitrogen-Vacancy Color Centers in Diamond,” Physical Review Letters, vol. 102, p. 195506, 5 2009.
- [30] A. P. Nizovtsev, S. Y. Kilin, V. A. Pushkarchuk, A. L. Pushkarchuk, and S. A. Kuten’, “Quantum registers based on single NV + n ¹³C centers in diamond: I. The spin Hamiltonian method,” Optics and Spectroscopy, vol. 108, no. 2, pp. 230–238, 2010.
- [31] 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, p. 205203, 5 2012.
- [32] F. Poggiali, P. Cappellaro, and N. Fabbri, “Measurement of the excited-state transverse hyperfine coupling in NV centers via dynamic nuclear polarization,” Physical Review B, vol. 95, p. 195308, 5 2017.
- [33] J. F. Barry, J. M. Schloss, E. Bauch, M. J. Turner, C. A. Hart, L. M. Pham, and R. L. Walsworth, “Sensitivity optimization for NV-diamond magnetometry,” REVIEWS OF MODERN PHYSICS, vol. 92, 2020.
- [34] P. Kehayias, M. J. Turner, R. Trubko, J. M. Schloss, C. A. Hart, M. Wesson, D. R. Glenn, and R. L. Walsworth, “Imaging crystal stress in diamond using ensembles of nitrogen-vacancy centers,” Physical Review B, vol. 100, p. 174103, 11 2019.
- [35] P. Udvarhelyi, V. O. Shkolnikov, A. Gali, G. Burkard, and A. Pályi, “Spin-strain interaction in nitrogen-vacancy centers in diamond,” Physical Review B, vol. 98, p. 075201, 8 2018.
- [36] A. Barfuss, M. Kasperczyk, J. Kölbl, and P. Maletinsky, “Spin-stress and spin-strain coupling in diamond-based hybrid spin oscillator systems,” Physical Review B, vol. 99, p. 174102, 5 2019.

- [37] G. Fuchs, V. Dobrovitski, R. Hanson, a. Batra, C. Weis, T. Schenkel, and D. Awschalom, “Excited-State Spectroscopy Using Single Spin Manipulation in Diamond,” Physical Review Letters, vol. 101, p. 117601, 9 2008.
- [38] E. R. Macquarrie, T. A. Gosavi, N. R. Jungwirth, S. A. Bhawe, and G. D. Fuchs, “Mechanical spin control of nitrogen-vacancy centers in diamond,” Physical Review Letters, vol. 111, no. 22, 2013.
- [39] A. B. Sannigrahi, “Derivation of selection rules for magnetic dipole transitions,” Journal of Chemical Education, vol. 59, no. 10, p. 819, 1982.
- [40] D. Lee, K. W. Lee, J. V. Cady, P. Ovartchaiyapong, and A. C. Jayich, “Topical review: Spins and mechanics in diamond,” 2017.
- [41] R. Fischer, C. O. Bretschneider, P. London, D. Budker, D. Gershoni, and L. Frydman, “Bulk Nuclear Polarization Enhanced at Room Temperature by Optical Pumping,” Physical Review Letters, vol. 111, p. 057601, 7 2013.
- [42] A. Gali, M. Fyta, and E. Kaxiras, “Ab initio supercell calculations on nitrogen-vacancy center in diamond: Electronic structure and hyperfine tensors,” Physical Review B, vol. 77, p. 155206, 4 2008.
- [43] A. P. Nizovtsev, S. Ya Kilin, A. L. Pushkarchuk, V. A. Pushkarchuk, and F. Jelezko, “Theoretical study of hyperfine interactions and optically detected magnetic resonance spectra by simulation of the C 291 [NV] - H 172 diamond cluster hosting nitrogen-vacancy center,” New Journal of Physics, vol. 16, p. 083014, 8 2014.
- [44] M. Newville, A. Ingargiola, T. Stensitzki, and D. B. Allen, “LMFIT: Non-Linear Least-Square Minimization and Curve-Fitting for Python,” Zenodo, pp. –, 9 2014.
- [45] M. Auzinsh, A. Berzins, D. Budker, L. Busaite, R. Ferber, F. Gahbauer, R. Lazda, A. Wickenbrock, and H. Zheng, “Hyperfine level structure in nitrogen-vacancy centers near the ground-state level anticrossing,” Physical Review B, vol. 100, p. 075204, 8 2019.
- [46] L. Busaite, R. Lazda, A. Berzins, M. Auzinsh, R. Ferber, and F. Gahbauer, “Dynamic ^{14}N nuclear spin polarization in nitrogen-vacancy centers in diamond,” Physical Review B, vol. 102, p. 224101, 12 2020.

- [47] J. P. King, K. Jeong, C. C. Vassiliou, C. S. Shin, R. H. Page, C. E. Avalos, H.-J. Wang, and A. Pines, “Room-temperature in situ nuclear spin hyperpolarization from optically pumped nitrogen vacancy centres in diamond,” Nature Communications, vol. 6, p. 8965, 12 2015.
- [48] V. Jacques, P. Neumann, J. Beck, M. Markham, D. Twitchen, J. Meijer, F. Kaiser, G. Balasubramanian, F. Jelezko, and J. Wrachtrup, “Dynamic Polarization of Single Nuclear Spins by Optical Pumping of Nitrogen-Vacancy Color Centers in Diamond at Room Temperature,” Physical Review Letters, vol. 102, p. 057403, 2 2009.
- [49] V. Ivády, K. Szász, A. L. Falk, P. V. Klimov, D. J. Christle, E. Janzén, I. A. Abrikosov, D. D. Awschalom, and A. Gali, “Theoretical model of dynamic spin polarization of nuclei coupled to paramagnetic point defects in diamond and silicon carbide,” Physical Review B, vol. 92, p. 115206, 9 2015.
- [50] R. Fischer, A. Jarmola, P. Kehayias, and D. Budker, “Optical polarization of nuclear ensembles in diamond,” Physical Review B, vol. 87, p. 125207, 3 2013.
- [51] G. Lindblad, “On the generators of quantum dynamical semigroups,” Communications in Mathematical Physics, vol. 48, pp. 119–130, 6 1976.
- [52] B. Smeltzer, J. McIntyre, and L. Childress, “Robust control of individual nuclear spins in diamond,” Physical Review A, vol. 80, p. 050302, 11 2009.
- [53] S. Felton, A. M. Edmonds, M. E. Newton, P. M. Martineau, D. Fisher, D. J. Twitchen, and J. M. Baker, “Hyperfine interaction in the ground state of the negatively charged nitrogen vacancy center in diamond,” Physical Review B, vol. 79, p. 075203, 2 2009.
- [54] F. Ticozzi and L. Viola, “Analysis and synthesis of attractive quantum Markovian dynamics,” Automatica, vol. 45, pp. 2002–2009, 9 2009.
- [55] J. R. Johansson, P. D. Nation, and F. Nori, “QuTiP 2: A Python framework for the dynamics of open quantum systems,” Computer Physics Communications, vol. 184, pp. 1234–1240, 4 2013.

- [56] 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, p. 155202, 4 2013.
- [57] M. W. Doherty, N. B. Manson, P. Delaney, F. Jelezko, J. Wrachtrup, and L. C. Hollenberg, “The nitrogen-vacancy colour centre in diamond,” Physics Reports, vol. 528, pp. 1–45, 7 2013.
- [58] L. T. Hall, P. Kehayias, D. A. Simpson, A. Jarmola, A. Stacey, D. Budker, and L. C. L. Hollenberg, “Detection of nanoscale electron spin resonance spectra demonstrated using nitrogen-vacancy centre probes in diamond,” Nature Communications, vol. 7, p. 10211, 4 2016.
- [59] M. Negyedi, J. Palotás, B. Gyüre, S. Dzsaber, S. Kollarics, P. Rohringer, T. Pichler, and F. Simon, “An optically detected magnetic resonance spectrometer with tunable laser excitation and wavelength resolved infrared detection,” Review of Scientific Instruments, vol. 88, p. 013902, 1 2017.
- [60] R. Lazda, L. Busaite, A. Berzins, J. Smits, F. Gahbauer, M. Auzinsh, D. Budker, and R. Ferber, “Cross-relaxation studies with optically detected magnetic resonances in nitrogen-vacancy centers in diamond in external magnetic field,” Physical Review B, vol. 103, p. 134104, 2021.
- [61] S. V. Anishchik, V. G. Vins, and K. L. Ivanov, “Level-crossing spectroscopy of nitrogen-vacancy centers in diamond: sensitive detection of paramagnetic defect centers,” arXiv, 9 2016.
- [62] E. van Oort and M. Glasbeek, “Cross-relaxation dynamics of optically excited N - V centers in diamond,” Physical Review B, vol. 40, pp. 6509–6517, 10 1989.
- [63] S. V. Anishchik and K. L. Ivanov, “Sensitive detection of level anticrossing spectra of nitrogen vacancy centers in diamond,” Physical Review B, vol. 96, p. 115142, 9 2017.
- [64] B. Scharfenberger, W. J. Munro, and K. Nemoto, “Coherent control of an NV – center with one adjacent ^{13}C ,” New Journal of Physics, vol. 16, p. 093043, 9 2014.

- [65] G. D. Fuchs, V. V. Dobrovitski, D. M. Toyli, F. J. Heremans, C. D. Weis, T. Schenkel, and D. D. Awschalom, “Excited-state spin coherence of a single nitrogen–vacancy centre in diamond,” Nature Physics, vol. 6, pp. 668–672, 7 2010.
- [66] J. Harrison, M. Sellars, and N. Manson, “Measurement of the optically induced spin polarisation of N-V centres in diamond,” Diamond and Related Materials, vol. 15, pp. 586–588, 4 2006.
- [67] I. Aharonovich, A. D. Greentree, and S. Prawer, “Diamond photonics,” Nature Photonics, vol. 5, pp. 397–405, 7 2011.