固态单自旋量子精密测量实验

廖荣
中国科学技术大学 微尺度物质科学国家研究中心 物理学院, 合肥 230026
合肥国家实验室，合肥 230088

1 实验原理

1.1 金刚石中的 NV 色心

NV（Nitrogen-Vacancy）色心是金刚石中的一种点缺陷，如图 1 所示。金刚石晶格中一个碳原子缺失形成空位，近邻的位置有一个氮原子，这样就形成一个 NV 色心，空位与氮原子的连线作为 NV 色心的方向。NV 色心由于用空位和氮原子替换了两个相邻的碳原子，从而导致相对于金刚石晶格有四种可能取向。

NV 色心，指的是带负电荷 NV—顺磁中心。NV 色心的有六个电子，两个来自氮原子，三个来自与空位相邻的碳原子，另外一个是俘获的（来自施主杂质的）电子。

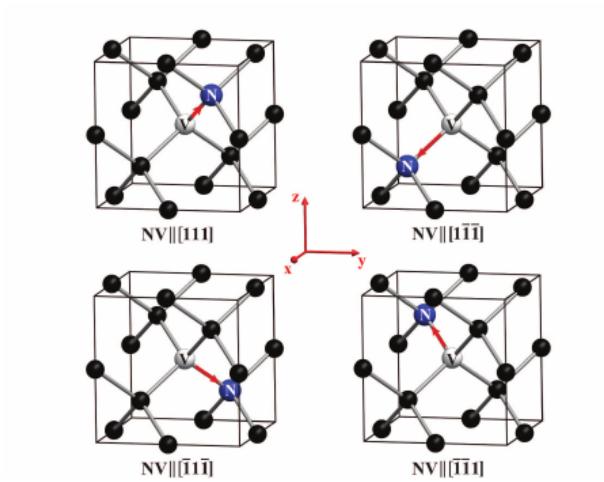

图 1: NV 色心主轴的四种可能方向，这些方向组成一个四面体

1.2 自旋态初始化和读出

NV 色心的基态为自旋三重态，三重态基态与激发态间跃迁相应的零声子线为 637nm，红色区域为声子边带。基态的自旋三重态（$|m_s=0\rangle$, $|m_s=1\rangle$，$|m_s=-1\rangle$）中，$|m_s=\pm1\rangle$ 在无磁场时是简并的，它们与 $|m_s=0\rangle$ 态之间的能隙（零场劈裂）对应微波频率为 2.87GHz。激发态的能级自旋分裂对应的微波频率为 1.4GHz。

由于 $|m_s=\pm1\rangle$ 态有更大的概率通过单重态回到基态，并且不发出荧光。所以 $|m_s=0\rangle$ 态的荧光比 $|m_s=\pm1\rangle$ 态的荧光强度大，实验上得出大约大 20 − 40%。根据 $|m_s=0\rangle$ 态和 $|m_s=\pm1\rangle$ 对应荧光强度的差别，就可以区分 NV 色心的自旋态，即实现对自旋量子比特状态的读出。

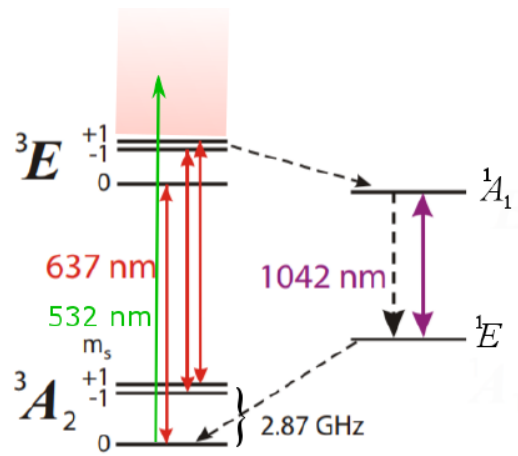

图 2: 室温下金刚石 NV 色心的能级结构示意图。会辐射出光子的跃迁用实线箭头表示，非辐射跃迁用虚线箭头表示

1.3 NV 色心与磁场的耦合

当 NV 色心处于磁场环境中，塞曼相互作用会使得 NV 基态能级随磁场变化发生劈裂或者移动。对于 NV 色心的基态能级而言，我们把 z 方向定义为 NV 色心的轴向，其哈密顿量可以写成以下形式：

$$H = DS_Z^2 + \gamma \cdot \vec{B} \cdot \vec{S} \tag{1}$$

其中 D 是 $|m_z=0\rangle$ 和 $|m_z=\pm1\rangle$ 态之间的在没有外磁场时的能隙（零场劈裂）对应微波频率为 2.87GHz。γ 为 NV 色心电子自旋的旋磁比，$\gamma = 2.8032MHz/Gs$。

假设当我们施加的外界磁场方向与 NV 色心的

轴向一致时，即 $\vec{B} = (0,0,B_z)$，那么哈密顿量 H 的矩阵形式为：

$$\begin{bmatrix} D+\gamma B_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D+\gamma B_z \end{bmatrix} \tag{2}$$

系统的本征态为 $|m_z=0\rangle$ 和 $|m_z=\pm1\rangle$，并且 $|m_z=0\rangle$ 向 $|m_z=\pm1\rangle$ 跃迁的共振频率为：

$$\nu_\pm = D \pm \gamma B_z \tag{3}$$

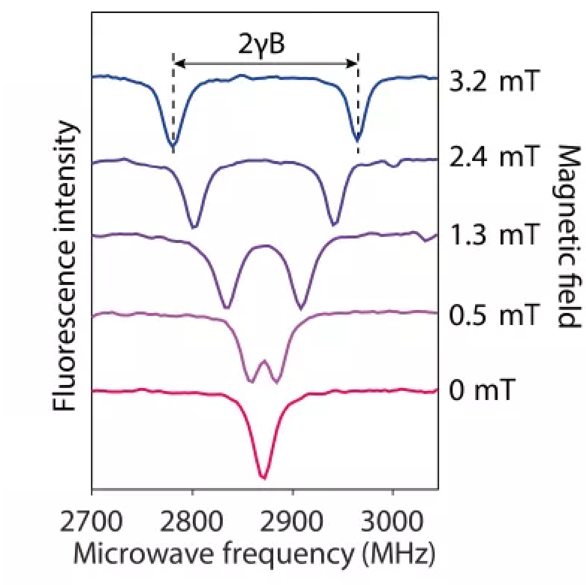

图 3: 不同磁场下的连续波谱

上面讨论的是外磁场与 NV 色心轴向一致的情况，当外磁场不沿 NV 轴的时候，此时 $\vec{B} = (B_x,B_y,B_z)$，那么哈密顿量 H 的矩阵形式为：

$$\begin{bmatrix} D+\gamma B_z & \frac{B_x\gamma}{\sqrt{2}} - \frac{iB_y\gamma}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{B_x\gamma}{\sqrt{2}} + \frac{iB_y\gamma}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{B_x\gamma}{\sqrt{2}} - \frac{iB_y\gamma}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{B_x\gamma}{\sqrt{2}} + \frac{iB_y\gamma}{\sqrt{2}} & D+\gamma B_z \end{bmatrix} \tag{4}$$

在我们的实验中，外场始终处在较小的量级 (<200MHz)，可以将不沿轴向的磁场部分考虑为微扰，此时哈密顿量给出的本征能量分别为：

$$D+\gamma B_z + \frac{\gamma^2(B_x^2+B_y^2)}{2D} \tag{5}$$

$$D-\gamma B_z + \frac{\gamma^2(B_x^2+B_y^2)}{2D} \tag{6}$$

$$-\frac{\gamma^2(B_x^2+B_y^2)}{2D} \tag{7}$$

从中可以看出，不沿 NV 轴的横向场与能级为二阶依赖关系且远小于 D 故在实验中可以忽略横向场对能级产生的影响，只关注轴向场导致的劈裂。

1.4 系综 NV 色心共振谱与外磁场关系

针对不同轴向的 NV 其谱线位置与外场的近似 (一阶微扰) 关系通过如下公式给出：

$$D + \frac{1}{\sqrt{3}}\gamma(B_x+B_y+B_z) \tag{8}$$

$$D + \frac{1}{\sqrt{3}}\gamma(-B_x-B_y-B_z) \tag{9}$$

$$D + \frac{1}{\sqrt{3}}\gamma(-B_x+B_y+B_z) \tag{10}$$

$$D + \frac{1}{\sqrt{3}}\gamma(B_x-B_y-B_z) \tag{11}$$

$$D + \frac{1}{\sqrt{3}}\gamma(-B_x-B_y+B_z) \tag{12}$$

$$D + \frac{1}{\sqrt{3}}\gamma(B_x+B_y-B_z) \tag{13}$$

$$D + \frac{1}{\sqrt{3}}\gamma(B_x-B_y+B_z) \tag{14}$$

$$D + \frac{1}{\sqrt{3}}\gamma(-B_x+B_y-B_z) \tag{15}$$

1.5 自旋态操控

使用自旋磁共振技术对自旋态进行操控。spin-1/2 的电子在外磁场中的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B_0} \tag{16}$$

而磁矩与自旋算符的关系为

$$\vec{\mu} = \gamma\vec{S} = \gamma\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} \tag{17}$$

取磁场为 z 轴方向，则

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\gamma B_0 & 0 \\ 0 & -\gamma B_0\end{pmatrix} := -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\omega_0 & 0 \\ 0 & -\omega_0\end{pmatrix} \tag{18}$$

记自旋初态为 $\psi_0 = a_0 0 + b_0 1$□ 其随时间的演化为

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{a} \\ \dot{b}\end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\omega_0 & 0 \\ 0 & -\omega_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a \\ b\end{pmatrix} \tag{19}$$

如果设 $|a_0| = \cos(\alpha/2), |b_0| = \sin(\alpha/2)$，可以得到

$$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\alpha \tag{20}$$

$$\langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\alpha\cos\left(\omega_0 t + \alpha_0\right) \tag{21}$$

$$\langle S_y\rangle = -\frac{\hbar}{2}\sin\alpha\sin\left(\omega_0 t + \alpha_0\right) \tag{22}$$

这表示自旋随着时间进动，现在考虑一个圆偏振的磁场

$$\begin{cases} B_x = B_1\cos\omega t \\ B_y = B_1\sin\omega t \end{cases} \tag{23}$$

代入薛定谔方程可以得到 t>0 时刻自旋向上的概率为

$$P_\uparrow = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega_0-\omega)^2}\sin^2\delta t \tag{24}$$

其中

$$\delta = \sqrt{\omega^2 + (\omega_0-\omega)^2} \tag{25}$$

通过这一过程我们可以实现自旋的拉比震荡，当 $\omega_1 t = \pi$ 时，量子比特由 $|0\rangle$ 完全跃迁至 $|1\rangle$，实现非门；当 $\omega_1 t = \pi$ 时，量子比特调制为 $|0\rangle \rightarrow \frac{|0\rangle + i|1\rangle}{\sqrt{2}}$.

2 实验装置

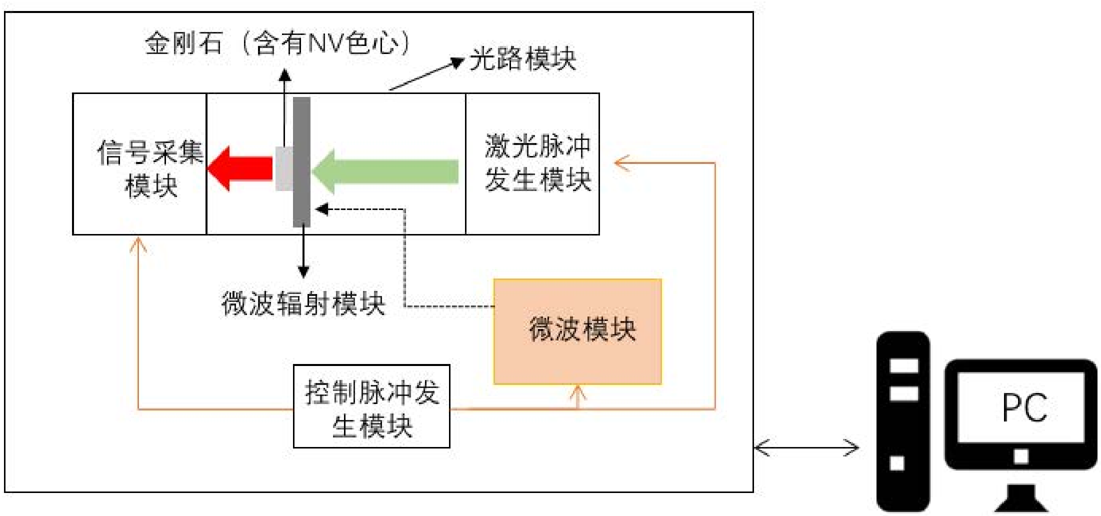

图 4: 实验装置图