Hesaplamalı nano-NMR ile kuantum noktalarında atomik çözünürlükte yapı analizi ve kuantum denetim

Program Kodu: 1001

Proje No: 114F409

Proje Yürütücüsü:
Prof. Dr. Ceyhun BULUTAY

Bursiyer:
Ekrem Taha GÜLDESTE

HAZİRAN 2018
ANKARA

Önsöz

Projede, InGaAs alaşımlı kuantum noktalarının, nano-NMR izgelerinden atomik yapı çıkarımı, çekin spin deviniminin anlaşılması ve denetimine yönelik kuramsal araştırmalar gerçekleştirilmiştir. Bilkent Üniversitesi Fizik Bölümünde normal süresi olan 36 ayda tamamlanmıştır. Projede yer alan beş adet iş paketinin hepsinde, Proje Önerisinde hedeflenen yakınında ilerleme kaydedilmiştir. Bir yüksek lisans öğrencisi projede bursiyer olarak yer almıştır; proje kapsamında yaptığı çalışmalara dayalı yüksek lisans tezini Temmuz 2018 ayı sonunda savunması planlanmıştır.

Projenin zamana bağlı NMR hesaplamaları bulguları sonucunda yürütücüye ait geniş bir makale 2017 yılında Physical Review A dergisinde yayımlanmıştır. Ayrıca Nisan 2018 tarihinde Physical Review B dergisine gönderilen, enaltyapı etkileşimi altındaki çekin spin hamam devinimine dair bir çalışmamız hakem incelemesindedir. Bunun dışında, deneysel veri sağlayan ortaklarımızla NMR nanoyapı çıkarımı üzerine bir makalenin hazırlanması da arzu edilmektedir. Projedeki ara sonuçlarımız, toplam dört bildiri olarak yurt içi ve yurt dışı konferanslarda sunulmuştur.

Proje başvurumuzda destek mektuplarıyla yer alarak ve çeşitli InGaAs kuantum noktalarının deneysel NMR izge verilerini ve görüşlerini bizimle paylaşarak sağladıkları önemli katkılar için İngiltere'den Sheffield Üniversitesi grubuna ve bilhassa Dr. E. A. Chekhovich'e şükranlarımızı ifade etmek istiyoruz.

Proje, TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir. Bu kuruma teşekkürlerimizi sunarız.

İçindekiler

1. GİRİŞ 1
2. LİTERATÜR ÖZETİ..... 1
2.1 Katıhalde NMR 1
2.2 Kuantum Noktalarındaki Gerinme Alanı ve Dörtkutup Etkileşimi 2
2.3 Kuantum Denetim Araştırmaları 3
2.4 Kuramsal Spin Devinim Çalışmaları 4
3. GEREÇ VE YÖNTEM..... 6
3.1 Genel Hamiltonyen 6
3.2 NMR İzgesinden Nanoyapı Çıkarımı 7
3.3 Yarıklasik Ortalama Alan Yaklaşımı 7
3.4 Topak İlinti Açılımı (CCE)..... 7
3.5 Çekin Spin Hamamının Overhauser Alanı..... 8
3.6 Zamana Bağlı NMR Hesaplamaları.....13
4. BULGULAR VE TARTIŞMA 16
4.1 Ters izgeli NMR verisinden nanoyapının çıkarımı 16
4.2 Yarı-klasik Benzetim ile Çekin Spin Hamam Devinimi.....24
4.3 Kuantum Mekaniksel Çekin Spin Hamam Devinimi.....28
4.4 Zamana Bağlı NMR Hesaplamaları.....31
4.5 Eşevresizlik Oluşumunun Nicel Olarak Karekterizasyonu 35
5. SONUÇ 48
Kaynaklar.....50
Ek: Proje ekibinin Physical Review B dergisinde hakem incelemesinde olan makalesi 53

Tablolar Listesi

Tablo 1. Projenin ilk yarısında denenen KN yapıları. 18
Tablo 2. Projenin ikinci yarısında denenen KN yapıları. 19

Şekiller listeleri

Şekil 1. Lens şeklinde InGaAs KN'sın (100) düzlemindeki arakesiti gösterilmektedir. Renk kodları hesaplanmış çifteksen gerinme alan değişimini atomik düzeyde göstermektedir. Turuncu renkli sıra, InAs ıslanma tabakasına (wetting layer) karşılık gelmektedir..... 3
Şekil 2. Wigner olasılığımsı (quasi-probability) dağılımları. (a) eşevreli spinin başlangıç hali, (b) eşevreli spinin döndürmeye uğramadan hemen önceki ($t = t_R^-$ anında) hali. (c) ve (e) eşevreli spinin döndürmeye uğradıktan hemen sonraki ($t = t_R^+$ anında) halleri. (d) ve (f) sistemin döndürmeden çok sonraki halleri. (g) ve (h) Sadakat (kırmızı) ve göreceli Kuantum Fisher Bilgi (rQFI) ifadelerinin kutba ve ekvatora–bağlı devinimleri.....15
Şekil 3. VN979 ve w194 kodlu InGaAs kuantum noktalarının Sheffield Üniversitesi'nde alınan deneysel NMR izgeleri. σ^+ ve σ^- , iki değişik dairesel ışık kutuplamasını göstermektedir. 16
Şekil 4. Atomik düzeyde KN yapısının çıkarımı için deneysel izge ile karşılaştırmalı döngüsü. 17
Şekil 5. Kod numaraları Tablo I'de verilen KN'larından bazılarının ara kesitleri. Gri renkler indiyum, mor renkler galyum atomlarını göstermektedir; bu kesitlere arsenik atomları girmemiştir.....20
Şekil 6. Bir önceki şekil ile aynı; farklı KN'ları gösterilmektedir.....20
Şekil 7. MG baskılanmış NMR ters izge. (a) Ölçülen, (b) Hesaplanan model, (c) Ortak karşılaştırma.....22
Şekil 8. MG baskılanmış NMR ters izgesi daha yukarda verilen model InGaAs KN'sının üst panelde (100) kristalografik kesitindeki atomik yapısı (mor atomlar: galyum, gri atomlar: indiyum), alt panelde elektron dalga fonksiyonu. 23
Şekil 9. Kutuplanmış farklı spin hamamları için merkez spinin devinimi, merkez spin $\frac{1}{2}$, etkin dış manyetik alan, $B = 1.0\hat{z}$, sönümlenme sabiti , $\lambda = 0$, dört kutup etkileşim sabiti, $\gamma_Q = 0$. En altyapı etkileşim sabitlerini ifade eden A_k 'lar $[-0.4, 0.6]$ arasında düzgün dağıtılmıştır.....24
Şekil 10. Farklı etkin dış manyetik alan B_0 değerleri için merkez spinin ilintisi. Merkez spin-$\frac{1}{2}$, $N = 19$ hamam spini, sönümlenme sabiti , $\lambda = 0$, dört kutup etkileşim sabiti, $\gamma_Q = 0$. 25
Şekil 11. Farklı sönümlenme sabiti, λ, değerleri için merkez spinin ilintisi. Merkez spin $\frac{1}{2}$, $N = 19$ hamam spini, etkin dış manyetik alan $B = 10.0\hat{z}$, dört kutup etkileşim sabiti $\gamma_Q = 0$ ..26
Şekil 12. Farklı eşyönsüzlük β, değerleri için merkez spinin ilintisi. Merkez spin $\frac{1}{2}$, $N = 699$ hamam spini, etkili dış manyetik alan, $B = 0.0$, sönümlenme sabiti, $\lambda = 0.0$, dört kutup etkileşim sabiti $\gamma_Q = 0$. 27
Şekil 13. Merkez spinin ilintisi $N = 699$ hamam spini, $B = 0.0$, $\lambda = 0.0$, $\gamma_Q = 1.0$. Merkez spinin uzunluğu $|S| = 1$ alınıp z bileşeni $S_z = 1/\sqrt{3}$ değerinde sabit tutulup diğer bileşenler birim çemberden rasgele olarak seçilmiştir. 27
Şekil 14. TİA-2,4,6'nın kesin çözümlerle karşılaştırılması. Burada $N = 12$, $J_f = 0.1$ ve spin-$\frac{1}{2}$ olarak alınmıştır. Siyah eğri kesin sonuçları, kırmızı eğri TİA-2'yi, mavi eğri TİA-4'ü, yeşil eğri ise TİA-6'yi ifade etmektedir.....28

Şekil 15. Farklı çift kutup etkileşim sabitlerinin ortalama değerleri için LY'nın TİA-4'le çözümü. Burada $N=50$, $\gamma_f=0$ ve spin-$\frac{1}{2}$ olarak alınmıştır. Başlangıç spin durumları Bloch küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir. 29
Şekil 16. Farklı γ_f değerleri için LY'nin zamana göre devinimi. Burada $N=50$, $J_f=0.1$ ve spin-$\frac{1}{2}$ olarak alınmıştır. Başlangıç spin durumları Bloch küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir. 29
Şekil 17. Farklı I değerleri için LY'nin zamana göre devinimi. Burada $N=50$, $J_f=0.01$ ve $\gamma_f=0$ olarak alınmıştır. Başlangıç spin durumları Bloch küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir. 30
Şekil 18. (a) ve (b) 'de kutba-bağlı ve ekvatora-bağlı sistemler için döndürülme anları , ve açıları için hesaplanan ve değerlerinin, çifteksenlilik parametresine göre değişimi.....31
Şekil 19. $\eta=1$ ve $I=5/2$ için sadakatin kutba-bağlı ve ekvatora-bağlı sistemlerde zamana göre devinimi. (a) döndürülme anı, (b) döndürülme açısı, (c) eşevreli spinin polar uzantıları ve (d) eşevreli spinin azimutal uzantıları. Burada kırmızı çizgiler optimum sadakat değerleri, mavi ve siyah kesikli çizgiler ise optimum sadakat değerlerinden sırasıyla, %5 ve %10 sapma ile hesaplanmıştır. 32
Şekil 20. Üç farklı faz kaybı oranı (γ) için kutba bağlı spin kedi durumlarında, sadakatin evrimi (sol panel) ve spin Wigner dağılımındaki değişim. 33
Şekil 21. Spin I=5/2 kedi durumları için sadakat gevşeme oranının ($1/\tau$), η değerine bağlı olarak spin I değerine göre ölçeklenmesi. 34
Şekil 22. LY'nın güç görüngesinin analitik ve nümerik karşılaştırması. 38
Şekil 23. (üst) $N=1000$ için Loschmidt Yankısı. İç şekiller yankıların yarım kalınlığını (half width) göstermektedir.(alt) Farklı değerlerinin LY'ye etkisi. Tüm durumlarda, $I=1/2$, $\Delta A_{max}=0.025\bar{A}$ ve hamamın başlangıç hali küre üzerinden düzgün dağılımla seçilmiştir...40
Şekil 24. (üst) $t=0$ anında çekin spin kutuplanmasının (θ_p) LY'na etkisi. (alt) En alt yapı etkileşim sabitininin seçilme aralığının LY'na etkisi (ΔA_{max}); Başlangıç çekin spin halleri Bloch küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir. Tüm durumlarda $N=100$, $I=1/2$ olarak alınmıştır. 41
Şekil 25. Farklı spin-I değerlerinin karşılaştırılması. (üst) Zaman eksenindeki davranış; Burada iç şekil farklı bir normalizasyonda tüm spin- eğrilerinin üst üste oturabileceğini göstermektedir. (alt) Frekans ekseninde ki davranış. Tüm durumlarda $N=1000$, $\Delta A_{max}=0.025\bar{A}$, olarak alınıp başlangıç hamam durumları Bloch Küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir. 43
Şekil 26. Faz dönmeli kanalın LY'na etkisi, (sol) spin-$1/2$, (right) spin-$3/2$. $N=100$, $\Delta A_{max}=0.3\bar{A}$. Başlangıç hamam spinleri Bloch küresi üzerinden düzgün dağılımla seçilmiştir. 44
Şekil 27. Farklı spin-I , kutuplanma dönme oranı durumları için LY'nin gerçekçi durumlarda görünge analizi. (üst) SiP kusur merkezi. (alt) GaAs kuantum noktası. 46
Şekil 28. Farklı büyüklükteki spin hamamları için LY'nin farklı bir normalizasyondaki hali. 47

Özet

Nükleer manyetik rezonans (NMR), yarım asırı aşkın süredir yapı analizi için yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir. Proje başlığındaki “nano-NMR” deyimi, makroskopik ölçekli örnekler yerine, nano boyutlu yapılar üzerinde işlevsel olacak özgün bir NMR türevine karşılık gelmektedir. Bu kuramsal çalışmada, InGaAs kuantum noktalarında (KN’larında) optik algılamalı NMR yöntemi çerçevesinde atomik düzeyde yapı analizi ve çekin spin hamamı devinimine dair iki farklı yönde araştırmalar gerçekleştirilmiştir. Birincisi, tahribatsız bir analitik gereç olarak özellikle malzeme bilimine katkı yapacak potansiyeldedir, ikinci yön ise nano-NMR ile kuantum denetim araştırmalarının geleceği açısından değerlidir.

Nano-NMR izgesinden atomik yapı çıkarımı çalışmalarımız, GaAs ortam içine gömülü olarak büyütülmüş InGaAs alaşımlı KN’larının uzaydaki atomik dağılımlarını deneysel NMR izgesi ile karşılaştırmalı olarak ortaya çıkarmıştır. Temel kuantum denetim araştırması çalışmalarımızda ise küçük spin hamamlarından, onbin mertebesinde çekirdek içeren spin hamamlarına kadar yarıklasik ve özgün topak ilinti açılım yöntemini kullanarak tamamen kuantum mekaniksel devinimleri hesaplanmıştır. Bilhassa enaltyapı etkileşimi altındaki eşevresizlik süreçleri, küçük ve büyük ebatlı model spin hamamlarının yanında, gerçekçi katıhal sistemlerinde de ayrıntılı olarak incelenmiştir. Son olarak, gerinmeli KN’larındaki çekin spinleri üzerinde etkili olan dörtkutup etkileşimini kullanarak uygun zamanda ve açıda uygulanacak bir dizi radyo frekans darbesiyle yapılacak Bloch küresinde döndürme işlemleri sonucunda Schrödinger spin kedisi durumlarının elde edilebileceği hesaplamalarımızla gösterilmiştir. Bu durumların kuantum hata düzeltme gibi uygulamaları söz konusudur. Genel anlamda ise projede elde edilen bulgular, malzeme bilimi ve yeni gelişen kuantum teknolojileri açısından değere sahiptir.

Anahtar Kelimeler: Katıhal NMR, yarıiletkenlerde kuantum denetim, topak ilinti açılımı, enaltyapı etkileşimi, Schrödinger spin kedisi durumları

Abstract

Nuclear magnetic resonance (NMR) is a widely used technique for over half a century for structural analysis. The “nano-NMR” phrase appearing in the project title alludes to a novel variant of NMR that can function on the nanoscale structures as opposed to conventional macroscopic samples. In this theoretical study, within the framework of the optically detected NMR technique, computational tools are developed for the atomic scale structural analysis, and nuclear spin bath dynamics in InGaAs quantum dots (QDs). The former is a non-destructive analytical tool that has the potential to contribute to the materials science, whereas the latter has the merit for the quantum control research using nano-NMR.

Our research on atomic structure extraction with comparison to an experimental nano-NMR spectra has successfully revealed the spatial atomic positions of InGaAs QDs embedded in a GaAs host matrix. In our fundamental quantum control studies, semiclassical as well as fully quantum mechanical simulations have been performed based on a novel cluster correlation expansion technique. Both of these are applied from small to very large nuclear spin baths, including realistic solid-state examples, where we particularly scrutinized the effect of the hyperfine interaction. Finally, by harnessing the quadrupolar interaction effective on nuclear spins in strained QDs, we have computationally shown that spin cat states can be generated using suitably timed radio frequency pulses acting as optimal degree rotations over the Bloch sphere. These states have the potential to be used in quantum error correction applications. In a wider context, the findings of this project can have some importance for the materials science and the emerging field of quantum technologies.

Keywords: Solid-state NMR, quantum control in semiconductors, cluster correlation expansion, hyperfine interaction, Schrödinger spin cat states

1. GİRİŞ

Hızla gündemimize girmekte olan kuantum teknolojilerinin vaat ettiği benzersiz olanaklara erişmek için öncelikle bu yeni olguların yarıiletken ortamında gerçekleştirilmesi önemlidir. Aşağıda Literatür Özetinde belirtileceği üzere, son on yıldaki yoğun araştırmalara karşın, ilerleme oldukça yavaş olmaktadır. Bu çalışmalarda özel amaçlı büyütülmüş yarıiletken kuantum noktaları (KN'ları) hala vazgeçilmez konumdadırlar. Söz konusu KN'larındaki hedefler: taşıyıcı ve çekin (nuclear) spinlerin uyarımı ve algılanması (tercihan optik olarak); spinler üzerinde gerekli kapılama işlemlerin (döndürme gibi) yapılabilmesi; ve tüm bu süreç boyunca spinlerin eşevresizlikten (decoherence) korunmasıdır. Proje, bu genel çerçeveyi dikkate alarak süregelen uluslararası deneysel çalışmalara hem destek hem de yön vermek hedefiyle, gerçekçi temeller üzerinde *atomik düzeyde* modeller, ve spin devinimine ışık tutacak hesaplamalar sunmaktadır.

2. LİTERATÜR ÖZETİ

2.1 Katıhalde NMR

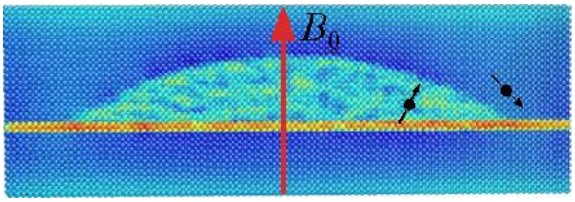
NMR yarım asırdan uzunca bir süredir yaygın olarak başvurulan hassas bir spektroskopi ve moleküler yapı tanımlama analitik metodudur. Özellikle yüzlerce çekirdek içeren proteinlerin yapısını anlamada kritik rol almıştır (Güntert vd., 2003). Bunun yanında yeni olarak kuantum denetim alanının ilkleri, 60 yıldır mükemmelleştirilmekte olan bir yöntem olmasıyla yine NMR ile başarılmıştır, kapsamlı bir inceleme makalesi için bkz. Vandersypen ve Chuang (2004). Fakat hem protein yapı tanımlama hem de kuantum denetim örneklerindeki ortak nokta, her ikisinin de sıvı hal ortamında gerçekleştirilmiş olmasıdır. Nedeni, sıvılardaki ısıl moleküler hareketlerin, çekin spinler arası çiftkutup etkileşimlerini milisaniye mertebeli ölçüm süresinde ortalamada sıfırlayarak (motional narrowing) "gürültüsüz" bir ortam durumunu benzetmesidir (Levitt, 2007). Kuantum teknolojilerinin yukarı ölçeklendirilebilmesi için sıvı hal uygun bir ortam değildir. Bu projenin amacı ise katı hal ortamında gömülü nanoyapılarda bu iki NMR uygulamasını hayata geçirmek için kuramsal altyapı ve dayanak oluşturmaktır.

Katı hal ortamında elektron spininin eşevreli devinimi çok eskiden beri ilgi çekmiş olgulardandır ve geçmişi NMR yönteminin ilk günlerine kadar uzanmaktadır bkz. örneğin, Herzog ve Hahn (1956). 1990'lı yılların sonlarına doğru kuantum algoritmaların gücünün anlaşılmasına paralel olarak (Nielsen ve Chuang, 2000) ortaya çıkan kuantum bilgisayar önerileri de yine katı hal ortamında bilhassa kuantum noktalarındaki (KN) elektron spininin eşevreli devinimi üzerine kurgulanmıştır (Loss ve DiVincenzo, 1998; Kane, 1998). Daha sonra eşevresizlik süreçleri üzerine yoğunlaşan araştırmacıların ilk aklına gelen unsur, spin-yörünge etkileşimi nedeniyle

spin özdurumlarının karışması olsa da, KN gibi yerelleşmiş elektronların fazı buna çok hassas değildir (Golovach vd., 2004). Varılan ortak bir yargı ile en altyapı çiftlenimiyle (hyperfine coupling) arka plandaki düzensiz kutuplu çekin spinleri ile etkileşim başat sorumlu olarak ilan edilmiştir (Khaetskii vd., 2002; Merkulov vd., 2002). Bugün geldiğimiz noktada ve özellikle bu araştırmada ise çekin spinleri, eşevreliliğinin korunduğu düzende malzeme yapısı açısından ortamın izini taşıyan gözlemcilerimiz ve bir bakıma içerdeki casuslarımız konumundadır. Sıkça kullanılan bir deyişle, sorun değil, bir "özkaynak" olarak düşünülmeleri mümkündür. Dolayısıyla araştırmamız, şimdiye kadar oldukça çalışılmış olan elektron eşevresizleşmesinden ziyade, arka planı oluşturan çekin spin hamamının optik algılamalı NMR düzeneğinde eşevresizleşme sürecini aydınlatmaktadır. Bunun yanında elektron spini eşevresizliği üzerine yapılan çalışmaların yapılacak araştırmaya önemli katkısı olacaktır.

2.2 Kuantum Noktalarındaki Gerinme Alanı ve Dörtkutup Etkileşimi

Projede odaklandığımız nanoyapı, GaAs örgüsü içine gömülü kendinden birleşimli (self assembled) olarak büyütülen InGaAs KN (Petroff, 2003). Malzeme hakkında genel olarak bilgi vermek gerekirse, InGaAs bir alaşımdır ($In_xGa_{1-x}As$), katyon atomları (In, Ga) *x* alaşım oranına göre anyon (As) atomlarının dört bağından birini oluştururlar. In-As ve Ga-As bağ uzunlukları, ve üçlü bağ açıları biribirinden farklı olduğu için KN içinde yerel gerinme alanları oluşur (Şekil 1). In, Ga, ve As dörtkutup (quadrupolar) spinli çekirdeğe sahip oldukları için bu gerinme alanının yarattığı elektrik alan gradyanı ile dörtkutup etkileşimleri enerji yarılmalarına yol açar Bulutay (2012). Şekil 1'de siyah oklarla betimlenen iki çekin spinini dikkate alacak olursak, dış manyetik alan altında dahi olsalar bu iki spinin çiftkutup etkileşimi sonucu karşıklıklı ters takla atması (flip-flop) olasıdır, ve Zeeman etkileşimi her konumda aynı olduğu için buna engel olmaz. Böyle bir durumda KN'sının içindeki kutuplanmış çekin spinleri çiftkutup üzerinden, bir anlamda dışardaki daha büyük spin hamamıyla etkileşerek eşevresizliğe uğrarlar. Oysa dörtkutup yarılmaları yerel boyutta değiştiği için karşılıklı ters takla atma olayı enerji korunumu ihlaline yol açar. Dolayısıyla, ancak daha yüksek dereceli etkileşimler ile spin difüzyonu mümkün olabilir ve bu sayede eşevrelilik uzatılmış olur.



Şekil 1. Lens şeklinde InGaAs KN'sın (100) düzlemindeki arakesiti gösterilmektedir. Renk kodları hesaplanmış çifteksen gerinme alan değişimini atomik düzeyde göstermektedir. Turuncu renkli sıra, InAs ıslanma tabakasına (wetting layer) karşılık gelmektedir.

Farklı koşullarda ve bileşimlerde büyütülen KN'larının yapısını anlamada tahribatsız yöntemler duyarlılık yönünden zayıf kalmaktadır. Örneğin, standart doyum (saturation) NMR'da aşağıda açıklanacağı üzere, sıvı hal deneylerindeki gibi Avogadro sayısı kadar çok değil, sadece yüzbinler mertebesinde çekirdek içeren tek bir KN göz önüne alındığında işaret/gürültü oranında sorunla karşılaşılmaktadır (Chekhovich vd., 2014). İşbirliği oluşturduğumuz Sheffield Üniversitesi grubunun 5 yıl kadar önce geliştirdiği ters izge tekniği (Chekhovich vd., 2012) bu yöndeki sorunları aşmada çok önemli bir kilometre taşıdır. Projemizdeki "Nano-NMR" deyimi, makroskopik ölçekli örnekler yerine, nano boyutlu yapılar üzerinde çalışabilen özgün bir (ayrıntıları aşağıda verilen) NMR yaklaşımını vurgulamak için kullanılmaktadır.

Zunger-Warburton-Koenraad gruplarının ortaklaşa yaptıkları bir çalışmada "spektroskopik döngüyü ters yönde tamamlama" fikri ileri sürülmüştür (Mlinar vd., 2009). Bu söz konusu yayında KN kompozisyonunu tahribatsız saptamak için fotoışıma (PL) izge yöntemine başvurulmuş ve elektron-deşik dalga fonksiyonlarının KN profiline göre değişimininden hareketle PL izgesinden yapı çıkarımı denenmiştir. Geçen 9 yıl içersinde başka gruplarca benimsenmemiş veya tekrarlanmamış olması, pek uygulanır olmadığı yargısını doğurmaktadır. İlkesel olarak çalışır gözükse de elektron/deşik dalga fonksiyonlarının atomik düzeydeki küçük değişimlere çok duyarlı olmaması bir bakıma normaldir. Bizim kullandığımız nano-NMR'a dayalı yöntem ise direk çekin spinlerine hassas olduğu için taşıyıcı dalga fonksiyonlarına göre atomik kompozisyon değişimine doğrudan duyarlı bir sonuç vermektedir.

2.3 Kuantum Denetim Araştırmaları

Projenin diğer ayağını oluşturan kuantum denetim geniş anlama sahip bir kavramdır, bu nedenle projemizle ilintili geçmiş çalışmalardan bahsetmek yerinde olacaktır. Spin sistemlerinde ve daha sonra kuantum optiğindeki ışık-madde etkileşiminde, ilk olarak NMR'da kullanılmış olan T_1, ve T_2 olarak adlandırılan iki önemli gevşeme zaman sabiti kullanılmaktadır. T_1 spin-örgü etkileşimi nedeniyle manyetik enerjinin gevşeme süresine karşılık gelir; T_2 ise tek

bir spinde fazın rasgele hale gelme süresini belirtir; T_1, ve T_2 biribirinden genellikle farklı, ama bazı özel durumlarda da basit bir şekilde ilişkilidir (Levitt, 2007). Aslında, spinler arası karmaşık çiftkutup devinimi için, e^{-t/T_2} gibi basit bir zaman bağımlılığı yetersizdir Witzel ve DasSarma (2006). Çekin spin hamamının sahip olduğu bellek nedeniyle ortaya çıkan Markov (diğer bir yazılışla, Markoff) dışı olarak adlandırılan süreçler dikkate alınmalıdır. En son çalışmalarda serbest tesirleme bozunması (free induction decay) işaretinin e^{-t^2} den e^{-t^4} düzenine geçiş nedenleri incelenmiştir (Balian vd., 2014).

Sayıca oldukça az da olsa literatürde çekin spinleri üzerine kuantum denetim önerileri mevcuttur: örnek olarak, elektrostatik olarak tanımlı ayrık kapılı komşu iki KN çekin spinleri arasında dolaşıklık (entanglement) oluşturma (Schuetz vd., 2013), ve çekin spinleri üzerinde Rabi salınım çalışmalarını (Makhonin vd., 2011) gösterebiliriz. Fakat, çekin spinlerinde dolaşıklık ve diğer kuantum ilintilerine dayalı uygulamaların henüz gerçekçi olmadığı düşüncesindeyiz. Bunun yerine dörtkutup etkileşimine dayalı kuantum denetim seçenekleri bu projede geliştirilmiş ve spin kedisi durumları en azından kuramsal olarak başarı ile elde edilmiştir. Dolayısıyla, InGaAs KN'larındaki çekin spinleri üzerine yapılacak nano-NMR ve eşevre devinim çalışmaları, hem nanoyapının izgeden nasıl çıkarılacağının anlaşılmasında hem de ilkel düzeyden başlayarak kuantum denetim yeteneklerinin geliştirilmesinde bir arakesit oluşturmaktadır.

2.4 Kuramsal Spin Devinim Çalışmaları

Günümüzdeki yarıiletken spin qubit araştırmalarına merkez spin modeli (central spin model - CSM) önemli kuramsal dayanak oluşturmuştur. CSM'nin kesin çözümü Bethe ansatz kullanarak Gaudin tarafından (Gaudin, 1976; Gaudin, 2014) ve cebirsel çözümü ise Sklyanin tarafından (Sklyanin, 1989) verilmiştir. Buna rağmen, çok karışık taban durum dalga fonksiyonu ve bundan dinamik bilgi çıkarmadaki güçlükler nedeniyle katı hal ve istatistik mekaniğinin hala meşhur problemleri arasındadır. Sayısal yaklaşımları düşündüğümüzde, kuantum mekaniğinde kesin çözüm denince ilk akla gelen doğrudan köşegenleştirme (direct diagonalization) türü yöntemler, etkileşen *N* tane spin-*I* içeren bir sistemde Hilbert uzayının $(2I+1)^N$ ile üstel olarak büyüdüğü için ancak *N*~30 gibi küçük sayılara kadar sahip olduğumuz bilgisayarlarda yapılabilir durumdadır (Dobrovitski ve Raedt, 2003). TDMRG (zaman bağımlı yoğunluk matrisi renormalizasyon grubu) gibi özel yöntemler son zamanlarda oldukça geliştirilmiş olsa da (White ve Feguin, 2004; Gobert vd., 2005; Schollwöck, 2005) daha çok bir boyutlu ve yine mütevazı 100-300 arası spin sayısı için uygun kaçmaktadır (Al-Hassanieh vd.,

2006). Öte yandan KN spin hamamı ve eşevresizliğinin güncel önemi nedeniyle, 10^4-10^5 miktarında kutuplanmış spin sistemlerinde CSM'nin çözülmesi gerekmektedir. Bu amaca uygun olabilecek yöntemlere kısaca değinmek istiyoruz. Bunlardan ilkinde (Vogt vd., 2013) katı hal fiziğinde eşevresizlik için yaygın olarak kullanılan Bloch-Redfield egemen denklemi, alışılmış Lindblad formundan çıkarılıp raslantısal (Stochastic) Schrödinger denklemine dönüştürülmüştür. Sayısal çözümü için ise 1990'lı yıllarda Mølmer ve grubu tarafından geliştirilen kuantum atlama (jump) tekniğine başvurulmuştur (Dalibard vd., 1992). Bu özgün yöntem, test olarak üstüniletken tek elektron tranzistör (SSET) üzerine uygulanmıştır. Yeni bir teknik olmasından ötürü başka gruplarca sınanmamıştır. Diğer oldukça farklı bir yaklaşım ise sayısal katı hal fiziğine katkılarıyla efsaneleşmiş isimlerden Liu Sham ve grubu tarafından önerilmiştir (Yao ve Sham, 2006). Burada hamam deviniminin baskın olarak çekin spinleri arası ikili ilintilerle anlaşılabileceği düşüncesi hakimdir. Sayısal çözümlemesine de yaratıcı bir bakış getirilmiş ve etkileşimler merkez spinin sankispin (pseudospin) uyarımları haline dönüştürülmüştür. Yakın zaman içinde başka gruplarca benzer topak ilinti açılımı (cluster-correlation expansion - CCE) formlarında uygulanmış olması yöntem açısından güven verici bir noktadır (Maze vd., 2008; Yang ve Liu, 2008; Witzel vd., 2012).

Bu son yöntem, Proje Önerimizde B-planı olarak yer almasına karşın, ilerleyen zaman zarfında ilk olarak kullanmayı düşündüğümüz *P*-gösterimi betimlemesi (Al-Hassanieh vd., 2006) yöntemine göre çok daha uygun ve geniş kapsamlı bir seçenek olduğu tarafımızca tesbit edilmiştir. Dolayısıyla, geliştirdiğimiz CCE yazılımı, ilgili işpaketlerinin ana motoru haline gelmiştir. Bunların dışında da Kuantum Monte Carlo gibi sadece taban durumunu çalışmaya yönelik sayısal yöntemler de mevcuttur (Syljuåsen vd., 2002), ama özel deneyim sahibi olunması gereken, pahalı bir tekniktir ve de zamana bağlı NMR tekniklerinin de yer aldığı projemizin amaçlarına uygun değildir.

3. GEREÇ VE YÖNTEM

3.1 Genel Hamiltonyen

KN'daki elektron spini ve arkaplandaki çekin spinlerinin durağan ve zamana bağlı dış manyetik alanlar ve kendi aralarındaki etkileşimlerini içeren Hamiltonyen operatörü, bizim araştırmamız açısından en genel halinde aşağıda verilmektedir

$$\hat{H} = \hat{H}_{eZ} + \hat{H}_{nZ} + \hat{H}_{hf} + \hat{H}_{Q} + \hat{H}_{d-d}.$$

Sağdaki terimler sırasıyla elektron Zeeman, çekin Zeeman, en altyapı, dörtkutup, çekin çiftkutup-çiftkutup etkileşimlerine karşılık gelmektedir. Her katkının içerikleri aşağıda verilmektedir

$$\hat{H}_{eZ} = \hbar g_e^* \mu_B \hat{S}_z B_0,\ \hat{H}_{nZ} = \sum_k \hbar \gamma_k B_0 \hat{I}_z^k,\ \hat{H}_{hf} = \sum_k A_k \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}}^k,$$

$$\hat{H}_Q = \frac{eQ_k}{6I^k\left(2I^k-1\right)} \sum_k \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta}^k \left[\frac{3}{2}\left(\hat{I}_\alpha^k \hat{I}_\beta^k + \hat{I}_\beta^k \hat{I}_\alpha^k\right) - \delta_{\alpha\beta}\left(\hat{I}^k\right)^2\right],\ \hat{H}_{d-d} = \sum_{k,l} \hat{\vec{I}}^k \cdot \vec{D}\left(\vec{R}^{kl}\right) \cdot \hat{\vec{I}}^l,$$

$$A_k = \frac{\mu_0}{4\pi} g_e^* \mu_B \gamma_k \frac{8\pi}{3} \left|\Psi\left(\vec{R}^k\right)\right|^2,\ D_{\alpha\beta}\left(\vec{r}\right) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\hbar \gamma_k \gamma_l}{r^3}\left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{3 r_\alpha r_\beta}{r^2}\right).$$

Burada B_0: *z*-ekseninde durağan dış manyetik alan vektörü, μ_B: Bohr magneton, μ_0: boşluğun (SI) manyetik geçirgenliği, $\hat{\vec{S}}$: boyutsuz elektron açısal momentum vektör operatörü, $\hat{\vec{I}}$: boyutsuz çekin açısal momentum vektör operatörü, g_e^*: elektron *g*-çarpanı, γ: çekirdek gyromanyetik oranı, *Q*: çekin elektriksel dörtkutup (electric quadrupole) momenti, $\vec{R}^k$: *k* çekin uzay koordinatı, $\vec{R}^{kl} \equiv \vec{R}^k - \vec{R}^l$, $\Psi\left(\vec{R}^k\right)$: *k* çekin koordinatındaki elektron dalga fonksiyonu, $V_{\alpha\beta}^k = \left.\frac{\partial^2 V}{\partial_\alpha \partial_\beta}\right|_{R^k}$: *k* çekin koordinatındaki kristal elektrik potansiyelinin uzaya göre ikinci türevi karşılığındadır. Bu son terim gerinme alanının çekin spin yönelimi üzerinde oluşturduğu etkileşimi göstermektedir ve KN gibi katı hal sistemlerinde örgünün bir nevi parmak izini taşımaktadır.

Ayrıca, kuantum denetim ve nanoyapı inceleme hesaplamalarında, bilinen sarsım (perturbation) kuramı çerçevesinde Hamiltonyene çekin NMR etkileşimi eklenecektir $\hat{H}_{NMR}(t) = \sum_k \hbar \gamma_k \hat{\vec{I}}^k \cdot \vec{B}_{NMR} \cos\left(\omega_{NMR} t\right)$, burada $\vec{B}_{NMR}$: genelde durağan $\vec{B}_0$ alanına dik, ve buna göre çok zayıf genlikli NMR değişken manyetik alanlanını göstermektedir.

3.2 NMR İzgesinden Nanoyapı Çıkarımı

Bir iş paketimize (1 no'lu) karşılık gelen bu fikrin oluşumu 112T178 no'lu TÜBİTAK 1001 projemizden kaynaklanmıştır. Söz konusu projede yüzbinlerce çekin spini içeren atomik Hamiltonyenle tanımlanmış InGaAs KN'larının NMR izgelerini hesaplamak için özel openMP paralel yazılım geliştirilmiştir. Dolayısıyla, nanoyapı çıkarımındaki yöntem, bu mevcut proje açısından özgün değildir, ayrıntıları proje önerimizde ve Bulutay vd. (2014) makalesinde verilmiştir.

3.3 Yarıklasik Ortalama Alan Yaklaşımı

KN'daki yüzbin mertebesindeki çekirdek sayısı nedeniyle çekin spin hamam devinimini anlamak için ilk başvuracağımız bu yöntemdir; yarıklasik olmasına karşın Loss grubu tarafından hangi durumlarda yararlı olabileceği kesin çözümlerle kaşılaştırılarak gösterilmiştir (Coish vd., 2007). Bu yaklaşımda çekin spin vektörleri $\hat{\vec{I}}^k$, kesikli değerlere sahip kuantum mekaniksel operatörler yerine, sürekli değerler alabilen klasik vektörler $\vec{I}^k$ olarak temsil edilmektedir. Dolayısıyla *k* çekin spin vektörü o koordinat ve zamandaki ortalama manyetik alan miktarınca $\frac{d}{dt}\vec{I}^k = \hbar\gamma_k \vec{I}^k \times \left[\vec{B}_0 + \vec{B}_{ort}(t)\right]$ yalpalamasını (precession) devam ettirecektir. Bu sayede çekirdek sayısı ile üstel değil (kuantum mekaniksel kesin çözümde olduğu gibi), doğru orantılı artan bir hesaplama bütçesi yeterli olmaktadır. Bu ortalama alanın hesaplanmasında en yukarıda verilen kuantum mekaniksel Hamiltonyen temel alınacağı için yöntemin adında "yarıklasik" ifadesi kullanılmaktadır. Çekin spin vektörlerinin çok sayıda ilk konfigürasyonu üzerinden tekrarlanacak benzetimler üzerinden ortalamalar elde edilecektir. Yarıklasik olmasına karşın yüksek çekirdek sayısı ve milisaniye mertebesinde zamana kadar devam etme gerekliliği nedeniyle yine de zorlayıcı bir hesap olacaktır. Biribirine bağlı diferansiyel denklemlerin çözümünde yaygın kullanılan Runge-Kutta (RK45) gibi ya da özel amaçlı Chebyshev polinom açılımına dayalı yöntemler (Tal-Ezer ve Kosloff, 1984) ilk akla gelen seçeneklerimizdir. Ayrıca tersinir olmayan etkilerin başında gelen, kutuplanmış KN çekin spinlerinin çevreleyen ortama difüzyonu için doğru sınır koşullarının oluşturulması ve dörtkutup etkileşiminin yarıklasik hareket denklemine sokulması gibi aslında basit olmayan teknik sorunların aşılması gerekmektedir.

3.4 Topak İlinti Açılımı (CCE)

Projenin 3. Gelişme raporunda Topak İlinti Açılımı (TİA) ile elde edilen çözümlerden bahsedilmişti. Fakat, o süre zarfına kadar kadar TİA-2'ye kadar elde edebildiğimiz sonuçlarda ufak hatalar mevcuttu. Bu süreçte basit hatalar giderilmiş TİA-6' ya kadar olan sonuçlara kadar

genişletilmiştir. 2'li etkileşimlerinde göz önünde bulundurulabildiği KİA yöntemi için ele aldığımız hamiltonyen,

$$H^{\pm} = \sum_{i,j} J_f J_{i,j} [\frac{1+\gamma_f}{2} X_i X_j + \frac{1-\gamma_f}{2} Y_i Y_j] \pm A_i \sum Z_i ,$$

Şeklinde ifade edilebilir. Burada J_f çift kutup etkileşimleri ile en altyapı etkileşimleri arasındaki mertebe farkını ifade edip gerçekçi bir spin hamamı için $J_f / A_i = 0.001$ dir. $J_f J_{i,j}$ çarpımı ise iki hamam spini arasındaki çift kutup etkileşim sabitini ifade etmektedir. γ_f değişkeni sayesinde ise spin korumalı olmayan hamiltonyen terimleri tamamen kapatılabilir ($\gamma_f = 0$). X_i, Y_i, Z_i ise i'inci sitedeki çekin spini için spin işlemcileridir. Ve son olarak A_i ise en altyapı etkileşim sabitidir.

TİA spin hamamını seçilen merbetedeki topakları ayırt edip dışarıda hiçbir topak kalmayana kadar her bir topak için kesin köşegenleştirme işlemi uyguladıktan sonra her bir topağın etkileşiminin birbiriyle çarpılmasına dayalı bir algoritmadır. Fakat bu süreçte küçük mertebeden topakların etkisi çıkarılmak durumundadır . Yani,

$$\tilde{l}_\varsigma \equiv \frac{\prod l_\varsigma}{\prod_{\varsigma' \subset \varsigma} \tilde{l}_{\varsigma'}},$$

Şeklinde alt topakların etkisi çıkarılır ve,

$$l = \prod_{\varsigma \subseteq \{1,2,..,N\}} \tilde{l}_\varsigma ,$$

ifadesiyle her bir topağın etkisi çarpılır. Bu durumda Loschmidt yankısı (LY)

$$M(t) \approx | l(t) |^2 ,$$

şeklini alır.

3.5 Çekin Spin Hamamının Overhauser Alanı

Çekin spinlerinin topluca oluşturduğu manyetik alana Overhauser alanı (A) adı verilmektedir. Özgün bir şekilde elde ettiğimiz Overhauser alan deviniminin zaman ve frekans uzaylarındaki çözümlemesini bu kısımda sunmak istiyoruz.

$$A^\alpha = \sum_{i=1}^{N} f_i S_i^\alpha ,$$

Burada f_i en alt yapı etkileşim sabiti, S^α ise spin işlemcilerini ifade etmektedir ($\alpha = x, y, z$). O halde çekin spin hamamının Overhauser Alanı aşağıdaki prosedürle hesaplanabilir.

$$\langle A^y \rangle = \langle B^{\pm}(t) | \sum_{i=1}^{N} f_i S_i^y | B^{\pm}(t) \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} f_i \langle B^{\pm}(t) | S_i^y | B^{\pm}(t) \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} f_i \langle B(0) | e^{iH^{\pm}t} S_i^y e^{-iH^{\pm}t} | B(0) \rangle$$

burada $H^{\pm} = \sum_{i=1}^{N} f_i S_i^z$ olarak tanımlanmıştır. O halde,

$$\langle A^y \rangle = \sum_{i=1}^{N} f_i \langle \Omega_i | e^{\pm i f_i S_i^z t} S_i^y e^{\mp i f_i S_i^z t} | \Omega_i \rangle$$

burada,

$$| \Omega_i \rangle = \sum_{m_i=-J_i}^{+J_i} \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i \end{pmatrix}^{1/2} \cos(\theta_i / 2)^{J_i + m_i} \sin(\theta_i / 2)^{J_i - m_i} e^{\phi_i (J_i - m_i)} | m_i \rangle$$

Burada $e^{\pm i f_i S_i^z t} S_i^y e^{\mp i f_i S_i^z t}$ terimi Baker - Hausdorf Lemma ile hesaplanabilir,

$$e^{(\pm i f_i S_i^z t)} S_i^y e^{-(\pm i f_i S_i^z t)} = S_i^y + [\pm i f_i S_i^z t, S_i^y] + \frac{1}{2!}[\pm i f_i S_i^z t, [\pm i f_i S_i^z t, S_i^y]]$$

$$+ \frac{1}{3!}[\pm i f_i S_i^z t, [\pm i f_i S_i^z t, [\pm i f_i S_i^z t, S_i^y]]] + \ldots$$

$$= S_i^y \cos(f_i t) \pm S_i^x \sin(f_i t)$$

Bu terim bra-ket notasyonun içine yazılırsa,

$$\langle A^y \rangle = \sum_{i=1}^{N} f_i \langle \Omega_i \,|\, [S_i^y \cos(f_i t) \pm S_i^x \sin(f_i t)] \,|\, \Omega_i \rangle.$$

S_i^x ve S_i^y terimleri spin yaratma ve yok etme işlemcilerinin lineer kombinasyonu olarak yazılabilir. Yani,

$$\langle A^y \rangle_{\pm} = \sum_{i=1}^{N} f_i [\cos(f_i t) \langle \Omega_i \,|\, \frac{S_i^+ - S_i^-}{2i} \,|\, \Omega_i \rangle \pm \sin(f_i t) \langle \Omega_i \,|\, \frac{S_i^+ + S_i^-}{2} \,|\, \Omega_i \rangle]$$

$$\langle \Omega_i \,|\, S_i^+ \,|\, \Omega_i \rangle = \langle \Omega_i \,|\, S_i^+ \sum_{m_i=-J_i}^{+J_i} \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i \end{pmatrix}^{1/2} \cos(\theta_i/2)^{J_i+m_i} \sin(\theta_i/2)^{J_i-m_i} e^{\phi_i (J_i - m_i)} \,|\, m_i \rangle$$

$$= \langle \Omega_i \,|\, \sum_{m_i=-J_i}^{+J_i} \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i \end{pmatrix}^{1/2} \cos(\theta_i/2)^{J_i+m_i} \sin(\theta_i/2)^{J_i-m_i} e^{\phi_i (J_i - m_i)} S_i^+ \,|\, m_i \rangle$$

$$= \langle \Omega_i \,|\, \sum_{m_i=-J_i}^{+J_i} \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i \end{pmatrix}^{1/2} \cos(\theta_i/2)^{J_i+m_i} \sin(\theta_i/2)^{J_i-m_i} e^{\phi_i (J_i - m_i)}$$

$$\times e^{-\phi_i (J_i - m_i)} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} \,|\, m_i + 1 \rangle$$

$$= \sum_{m_i', m_i} \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i' \end{pmatrix}^{1/2} \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i \end{pmatrix}^{1/2} \cos(\theta_i/2)^{J_i+m_i+m_i'} \sin(\theta_i/2)^{J_i-m_i-m_i'}$$

$$\times e^{\phi_i (m_i' - m_i)} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} \langle m_{i'} \,|\, m_i + 1 \rangle$$

O halde,

$$\langle \Omega_i \,|\, S_i^+ \,|\, \Omega_i \rangle = \sum_{m_i', m_i} w_i^{m_i', m_i} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} \delta_{m_i', m_i + 1}$$

Benzer şekilde,

$$\langle \Omega_i \,|\, S_i^- \,|\, \Omega_i \rangle = \sum_{m_i', m_i} w_i^{m_i', m_i} \sqrt{(J_i + m_i)(J_i - m_i + 1)} \delta_{m_i', m_i - 1}$$

Halini alır. Burada,

$$w_i^{m_i',m_i} = \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i' \end{pmatrix}^{1/2} \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i \end{pmatrix}^{1/2} \cos(\theta_i/2)^{J_i+m_i+m_i'} \sin(\theta_i/2)^{J_i-m_i-m_i'} e^{\phi_i(m_i'-m_i)}$$

olarak tanımlanmıştır. Aşağıdaki eşitliğe bakılırsa,

$$(\langle \Omega_i \mid S_i^+ \mid \Omega_i \rangle)^* = \langle \Omega_i \mid S_i^- \mid \Omega_i \rangle$$

O halde,

$$\sum_{m_i',m_i} (w_i^{m_i',m_i} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} \delta_{m_i',m_i+1})^* = \sum_{n_i',n_i} w_i^{n_i',n_i} \sqrt{(J_i + n_i)(J_i - n_i + 1)} \delta_{n_i',n_i-1}$$

$$\sum_{m_i} (w_i^{m_i+1,m_i})^* \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} = \sum_{n_i} w_i^{n_i-1,n_i} \sqrt{(J_i + n_i)(J_i - n_i + 1)}$$

Herhangibir genelleme kaybı olmadan $n_i = m_i + 1$ olarak seçilebilir.

$$\sum_{m_i} (w_i^{m_i+1,m_i})^* \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} = \sum_{m_i} w_i^{m_i,m_i+1} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)}$$

Benzer terimler birbirine eşitlendiğinde,

$$(w_i^{m_i+1,m_i})^* = w_i^{m_i,m_i+1}.$$

İfadesine varılır. O halde,

$$\langle \Omega_i \mid \frac{[S_i^+ - S_i^-]}{2i} \mid \Omega_i \rangle = \frac{1}{2i} \Big(\sum_{m_i',m_i} w_i^{m_i',m_i} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} \delta_{m_i',m_i+1}$$

$$- \sum_{n_i',n_i} w_i^{n_i',n_i} \sqrt{(J_i + n_i)(J_i - n_i + 1)} \delta_{n_i',n_i-1} \Big)$$

$$= \frac{1}{2i} \sum_m \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} \left(w_i^{m_i+1,m_i} - w_i^{m_i,m_i+1} \right)$$

Burada, $w_i^{m+1,m} = \Theta_i^m e^{(-i\phi)}$ olarak yazılabilir. O halde $w_i^{m,m+1} = \Theta_i^m e^{(i\phi)}$

Burada,

$$\Theta_i^m = \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i \end{pmatrix}^{1/2} \begin{pmatrix} 2J_i \\ J_i + m_i + 1 \end{pmatrix}^{1/2} \cos(\theta_i/2)^{2J_i+2m_i+1} \sin(\theta_i/2)^{2J_i-2m_i-1}$$

$$\langle \Omega_i \mid \frac{[S_i^+ - S_i^-]}{2i} \mid \Omega_i \rangle = \sum_{m_i} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)}\Theta_i^m \left(\frac{e^{i\phi_i} - e^{-i\phi_i}}{2i} \right)$$

$$= \sum_{m_i} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)}\Theta_i^m \sin(\phi_i)$$

Benzer şekilde,

$$\langle \Omega_i \mid \frac{[S_i^+ + S_i^-]}{2} \mid \Omega_i \rangle = \sum_{m_i} \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)}\Theta_i^m \cos(\phi_i)$$

O halde,

$$\langle A^y \rangle_{\pm} = \sum_{i=1}^{N} f_i \sum_{m_i} \Theta_i^m \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} \left[\pm \sin(f_i t)\cos(\phi_i) + \cos(f_i t)\sin(\phi_i) \right]$$

Aynısı $\langle A^x \rangle_{\pm}$ için yapıldığında aşağıdaki ifadeye varılabilir

$$\langle A^x \rangle_{\pm} = \sum_{i=1}^{N} f_i \sum_{m_i} \Theta_i^m \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)} \left[\mp \sin(f_i t)\sin(\phi_i) + \cos(f_i t)\cos(\phi_i) \right]$$

Ve $\langle A^z \rangle$ zamandan bağımsız bir değer çıkmaktadır.

Fourier Dönüşümleri ise,

$$FT(\langle A^y \rangle_{\pm}) = \sum_{i=1}^{N} f_i \sum_{m_i} \Theta_i^m \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)}$$

$$\left[\pm \frac{\cos(\phi_i)}{2i} [\delta(f - \frac{f_i}{2\pi}) - \delta(f + \frac{f_i}{2\pi})] \right.$$

$$\left. + \frac{\sin(\phi_i)}{2} [\delta(f - \frac{f_i}{2\pi}) + \delta(f + \frac{f_i}{2\pi})] \right]$$

$$FT(\langle A^x \rangle_{\pm}) = \sum_{i=1}^{N} f_i \sum_{m_i} \Theta_i^m \sqrt{(J_i - m_i)(J_i + m_i + 1)}$$

$$\left[\mp\frac{\sin(\phi_i)}{2i}[\delta(f-\frac{f_i}{2\pi})-\delta(f+\frac{f_i}{2\pi})]\right.$$

$$\left.+\frac{\cos(\phi_i)}{2}[\delta(f-\frac{f_i}{2\pi})+\delta(f+\frac{f_i}{2\pi})]\right]$$

şeklinde hesaplanacağını bulmuş oluyoruz.

3.6 Zamana Bağlı NMR Hesaplamaları

Bu kısımda zamana bağlı NMR hesaplamaları adlı işpaketimiz için kuantum denetim amacıyla geliştirdiğimiz özgün bir Schrödinger spin kedisi oluşturma yönteminin kuramsal altyapısına yer vermekteyiz.

3.6.1 Schrödinger Spin Kedisi Durumları

Hesaplamaların temelinde yer alan, eşevreli spin durumları, döndürme işlemcisinin z ekseni üzerinde olan bir spin durumuna uygulanması ile elde edilebilir,

$$|\theta,\phi>=\hat{R}(\theta,\phi)\,|I,I>.$$

Burada, $\hat{R}(\theta,\phi)$ döndürme işlemcisi, θ kutupsal açı olup, $(\sin\phi,\cos\phi,0)$ vektörü etrafında döndürmektedir. Kuantum ölçüm ve kuantum bilgi teknolojileri için, eşevreli spin durumlarının üstdüşümleri önemli bir rol oynamaktadır. Bu tür eşevreli spin durumlarına Schrödinger spin kedisi durumları denilmektedir. Yani,

$$[|Y>+e^{i\varphi}\,|-Y>]/\mathrm{N}\ ,\ [|Z>+e^{i\varphi}\,|-Z>]/\mathrm{N},$$

gibi spin halleri Schrödinger spin kedisi durumlarını ifade etmektedir. Burada, $|\pm X>,|\pm Y>,|\pm Z>$ gibi ifadeler 6 eksenli Bloch Küresinin yönlerini tarif eder. $[|Y>+e^{i\varphi}\,|-Y>]/\mathrm{N}$ gibi durumlar, ekvatora-bağlı (equator-bound) $[|Z>+e^{i\varphi}\,|-Z>]/\mathrm{N}$ gibi durumlar ise kutba-bağlı (pole-bound) ket durumları olarak ifade edilebilir.

Oluşturulan eşevreli spin durumu, $|\alpha>$ 'nın istenen $|\beta>$, durumunu ne kadar yakından elde edebileceğini ölçümlemek adına sadakat (fidelity) kavramı önem taşımaktadır. Sadakat, $|<\alpha|\beta>|^2$ şeklinde ifade edilebilir. Bu ölçümleme, sistemin mutlak makroskopikliği üzerinden

de Kuantum Fisher Bilgisi (Quantum Fisher Information, QFI) temelli yöntemlerle de gerçekleştirilebilir.

3.6.2 Schrödinger Spin Kedisi Durumlarını Nasıl Üretiyoruz?

Bloch küresi üzerinde $+x$ yönünde uzanan bir eşevreli spin durumu (Coherent Spin State, CSS) ele alındığında, $|+X\rangle = |\theta_{CSS} = \pi/2, \phi_{CSS} = 0\rangle$ (Şekil 2-a), bu durum ilk olarak, sıkışmayan eksenin ekvatoral düzlemden $\pi/4$ oranında döndürülmüş haliyle sıkışma aşamasına girer (Şekil 2-b). Bu hal, $+x$ ekseni etrafında dönmekte olan bir darbe (rotating pulse) ile sona erdirilir. Dönen darbe, Eşevreli spin durumunun kutba-bağlı (Şekil 2-c) ya da, ekvatora-bağlı (Şekil 2-e) uzanımına neden olur. Bu aşamadan sonra ise, eşevreli spin durumunun, Bloch küresi üzerinde devinimi, sabit noktalar etrafında, farklı yarımküreler için taban tabana zıt olmak üzere, Şekil 2-d ve f'deki gibi bir olasılık dağılımına neden olur.

3.6.3 Eşevresizlik Altında Devinim

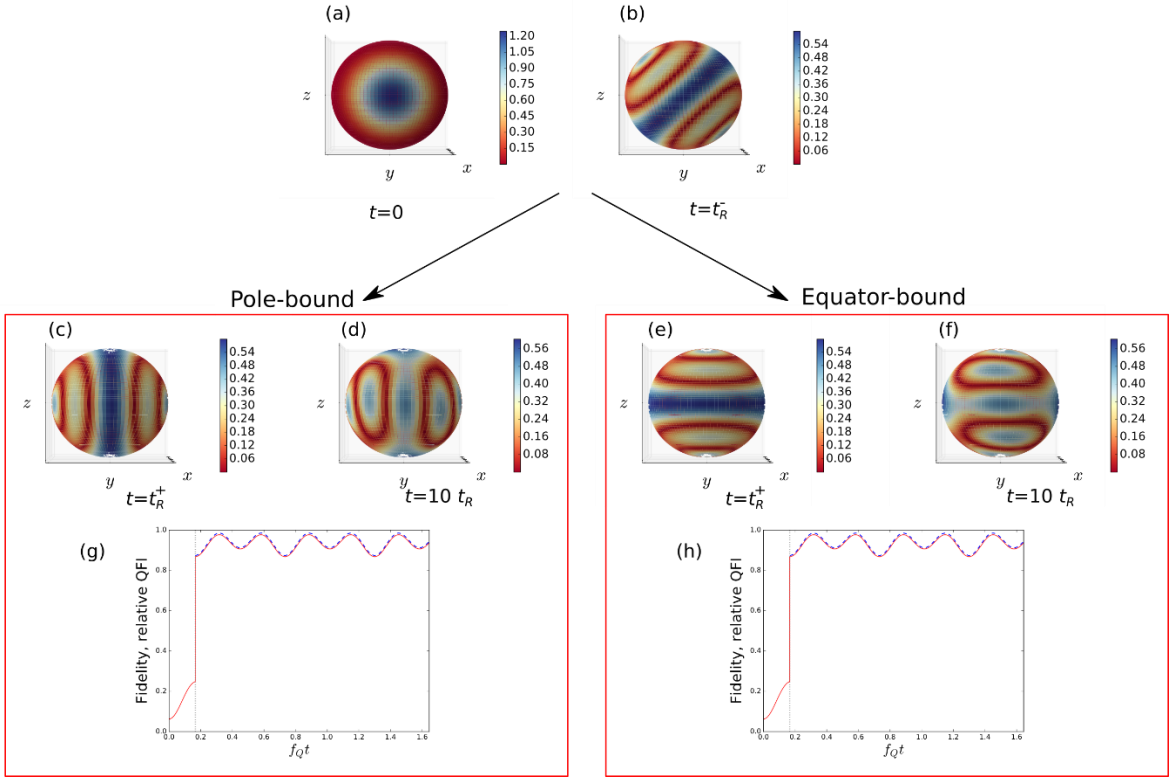
Diğer önemli bir husus çevre ile etkileşim sonucu ortaya çıkan eşevresizliğin (decoherence) dahil edilmesidir. Lindblad Egemen Denklem (Master Equation) yaklaşımında (Nielsen ve Chuang, 2000), çekin spininin evrimi

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\rho}_S(t)\right] + \sum_{m=1}^{2I}\left[\hat{L}_m\hat{\rho}_S(t)\hat{L}_m^{\dagger} - \frac{1}{2}\left\{\hat{L}_m^{\dagger}\hat{L}_m, \hat{\rho}_S(t)\right\}\right],$$

şeklinde hesaplanır. Burada, $\hat{\rho}_S, \hat{L}_m$ sırasıyla çekin spini yoğunluk işlemcileri ve Lindblad çökme işlemcisine karşılık gelmektedir. Bizim ilgilendiğimiz çevre koşulu olan faz dönmeli kanaldaki spin-I için bu işlemci

$$\hat{L}_m = \sqrt{\binom{2I}{m}\left(\frac{1-e^{-\gamma}}{2}\right)^m\left(\frac{1+e^{-\gamma}}{2}\right)^{2I-m}}\ \hat{I}_z^m,$$

şeklindedir, burada $\hat{I}_z$ z-yönlü spin açısal momentum işlemcisini, ve $\gamma = 1/T_2$ faz kaybı oranını göstermektedir. Sonuçlarımız, takip eden ilgili kısımda verilmektedir.

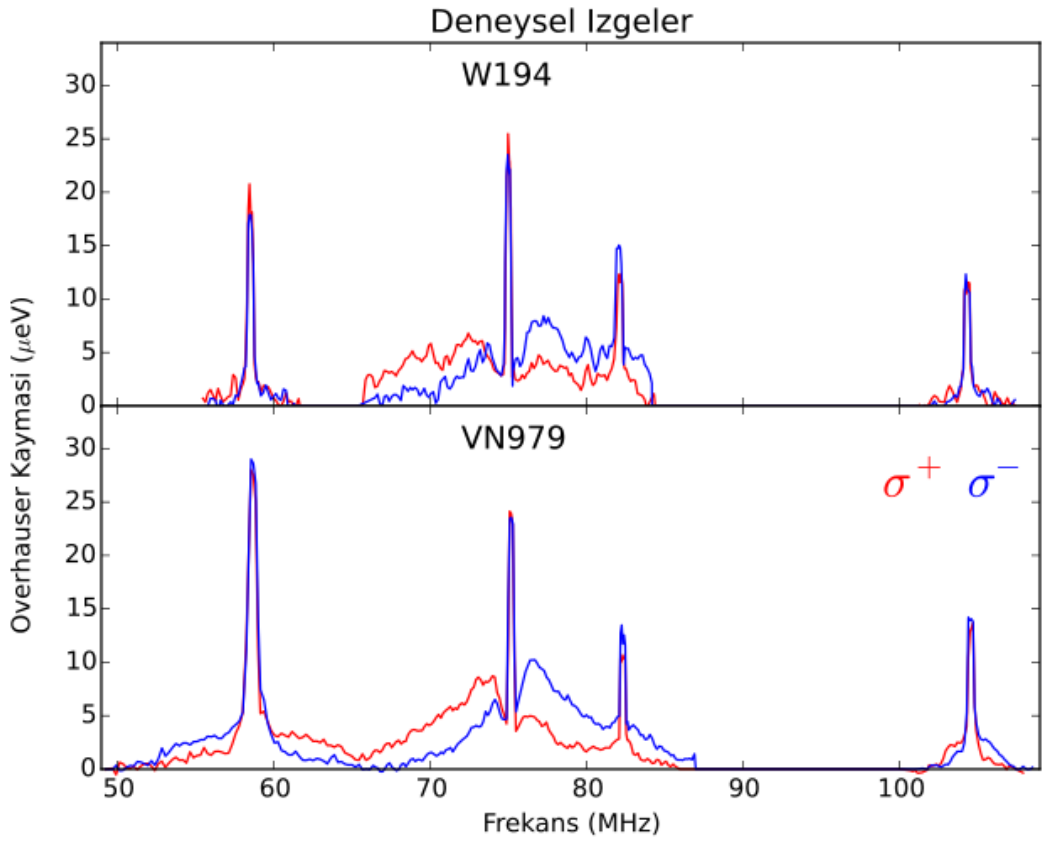


Şekil 2. Wigner olasılığımsı (quasi-probability) dağılımları. (a) eşevreli spinin başlangıç hali, (b) eşevreli spinin döndürmeye uğramadan hemen önceki ($t = t_R^-$ anında) hali. (c) ve (e) eşevreli spinin döndürmeye uğradıktan hemen sonraki ($t = t_R^+$ anında) halleri. (d) ve (f) sistemin döndürmeden çok sonraki halleri. (g) ve (h) Sadakat (kırmızı) ve göreceli Kuantum Fisher Bilgi (rQFI) ifadelerinin kutba ve ekvatora–bağlı devinimleri.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

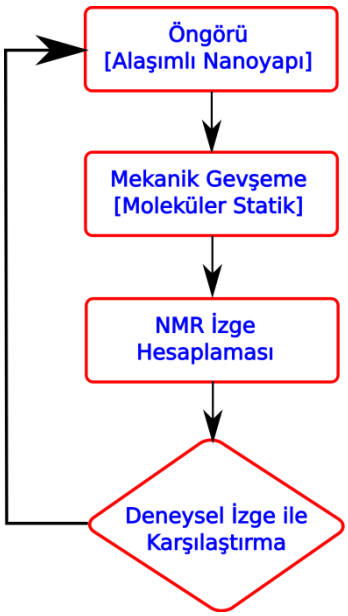
4.1 Ters izgeli NMR verisinden nanoyapının çıkarımı

Bu iş paketinin amacı, yakın zaman önce yayımlanmış Bulutay vd. (2014), sadece kuramsal çerçeveli NMR izge çalışmalarımızı, gerçek kuantum nokta (KN) örneklerine ait nanoyapıların çıkarılmasına taşımaktır. Sheffield Üniversitesi'nden E.A. Chekhovich liderliğindeki grup, bu tür ölçümleri (bilgimiz dahilinde) dünyada gerçekleştirebilen yegane ekiptir. Proje başvurumuza verdikleri destek mektuplarında vaad ettikleri üzere ellerindeki yeni NMR izge ölçümlerini, tarafımıza bu proje başladıktan sonra iletmişlerdir. Birisi Sheffield Üniversitesi'nde (VN979), ve diğeri Toshiba Cambridge Laboratuvarında (w194) büyütülen iki farklı InGaAs KN'sının NMR izgesi Şekil 3'de gösterilmektedir.



Şekil 3. VN979 ve w194 kodlu InGaAs kuantum noktalarının Sheffield Üniversitesi'nde alınan deneysel NMR izgeleri. σ^+ ve σ^- , iki değişik dairesel ışık kutuplamasını göstermektedir.

Bu izgelere sahip nanoyapıların bulunmasına yönelik kullandığımız döngü Şekil 4'de gösterilmektedir. Burada sayısal olarak en yoğun kısım, her bir aday KN yapısının moleküler statik yöntemiyle mekanik denge konumuna ulaştırılmasıdır. KN'sının parmak izini taşıyan tüm ayrıntılar gerinme alan farklılıklarında yatmaktadır. Hesaplarımıza ait teknik ayrıntılar Bulutay vd. (2014) makalesinde verilmiştir.



Şekil 4. Atomik düzeyde KN yapısının çıkarımı için deneysel izge ile karşılaştırmalı döngüsü.

4.1.1 Model KN Yapıları

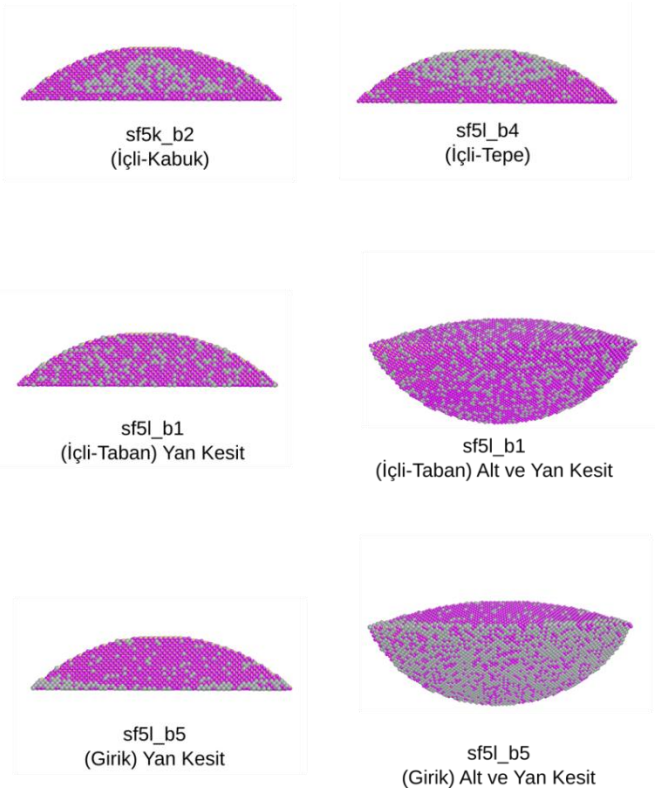
Örnekleri büyüten gruplar tarafından $In_xGa_{1-x}As$ KN'larındaki indiyum molar oranı ve kabaca lens yapısında olduğu belirtilen bu yapıların yükseklik ve genişlik aralıkları bize aktarılmıştır. Bu genel bilgilerden yola çıkarak Tablo 1 ve 2'de verilen çok sayıda KN modeli oluşturulmuş, ve Şekil 4'deki döngüye sokulmuştur. Bu tablolarda yer alan yüzden fazla modele ait hesaplamalar neredeyse aralıksız proje süresince, değişen yoğunlukta devam etmiştir. Matris atomları da dikkate alındığında her bir yapıda 3 milyon mertebesinde atom yer almaktadır, dolayısıyla mekanik denge (moleküler statik) hesapları her bir yapı için aşamalı olarak 64 çekirdekli paralel sunucuda 3 hafta kadar süre almaktadır. Bu yapılardan bazıları için atomik kesit dağılımları Şekil 5 ve 6'da görülmektedir.

Tablo 1. Projenin ilk yarısında denenen KN yapıları.

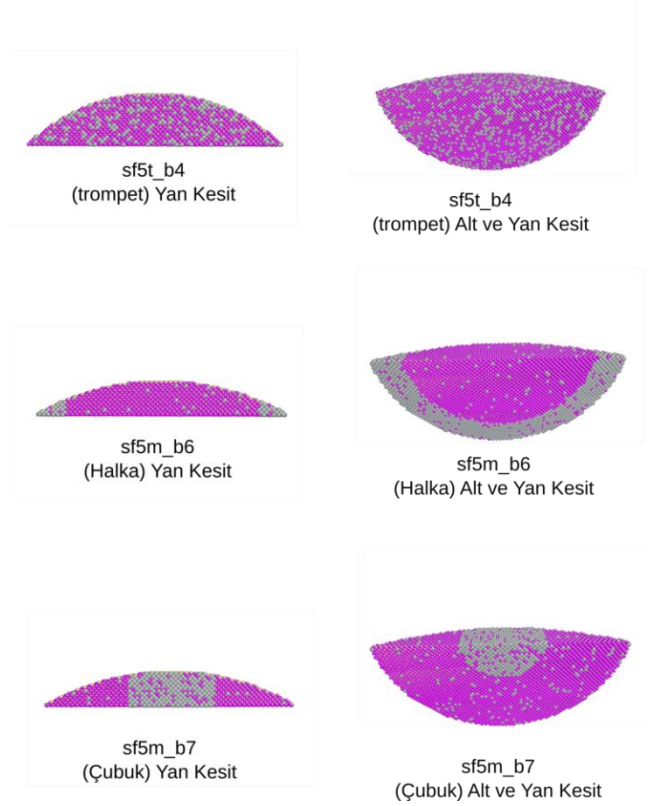
Kod	Yükseklik	Genişlik	Tip	x_Indiyum	Alaşım Profi	Tavlama	WL Galyum
sf5k_b1	6 nm	30 nm	lens	15%	İçli-Kabuk	25%	Yok
sf5k_b2	6 nm	30 nm	lens	21%	İçli-Kabuk	40%	Yok
sf5l_b1	6 nm	30 nm	lens	26%	İçli-Taban	70%	Yok
sf5l_b2	6 nm	30 nm	lens	26%	İçli-Taban	40%	Yok
sf5l_b3	6 nm	30 nm	lens	26%	İçli-Taban	25%	Yok
sf5l_b4	6 nm	30 nm	lens	26%	İçli-Tepe	30%	Yok
sf5l_b5	6 nm	30 nm	lens	26%	Girik	30%	Yok
sf5l_b6	6 nm	30 nm	lens	26%	Halka	30%	Yok
sf5l_b7	6 nm	30 nm	lens	26%	Halka	25%	70%
sf5t_b1	6 nm	30 nm	lens	21%	trompet	60%	Yok
sf5t_b2	6 nm	30 nm	lens	21%	trompet	30%	Yok
sf5t_b4	6 nm	30 nm	lens	26%	trompet	70%	Yok
sf5l_r1	6 nm	30 nm	lens	26%	Ters trompet	30%	Yok
sf5m_b1	6 nm	30 nm	lens	21%	Halka	20%	90%
sf5m_b2	6 nm	30 nm	lens	21%	İçli-Taban	25%	90%
sf5m_b3	6 nm	30 nm	lens	21%	Çubuk	45%	90%
sf5m_b4	4 nm	30 nm	lens	20,5%	Halka	15%	100%
sf5m_b5	7 nm	30 nm	lens	20,5%	Halka	15%	100%
sf5m_b6	4 nm	30 nm	lens	20,3%	Çubuk	13%	65%
sf5m_b7	4 nm	30 nm	lens	21%	Çubuk	25%	65%
sf5m_b8	4 nm	25 nm	lens	20,3%	Halka	13%	65%
sf5m_b9	4 nm	40 nm	lens	20,3%	Halka	13%	65%
sf5m_b10	3.5 nm	35 nm	lens	20,3%	Halka	13%	65%
sf5m_b11	3.5 nm	35 nm	lens	24%	Çubuk	25%	65%
sf5m_b12	3.5 nm	40 nm	lens	24,7%	Çubuk	25%	100%
sf5m_b13	3.5 nm	40 nm	lens	24,7%	Çubuk	20%	50%
sf5m_b14	3 nm	35 nm	lens	24,7%	Çubuk	25%	100%
sf5m_b15	3.5 nm	35 nm	lens	21,0%	Çubuk	15%	50%
sf5m_b16	4 nm	35 nm	lens	20,5%	Çubuk	12%	50%
sf5m_b17	3.5 nm	35 nm	lens	20,5%	Çubuk	12%	50%
sf5m_b18	4 nm	35 nm	lens	23,8%	Çubuk	12%	100%
sf5m_b19	4 nm	35 nm	lens	19,8%	Çubuk	12%	Yok
sf5m_b20	4 nm	35 nm	lens	23,0%	Çubuk	12%	75%
sf5m_b21	4 nm	35 nm	lens	23,5%	Çubuk	20%	75%
sf5m_b22	4 nm	35 nm	lens	24,0%	Çubuk	15%	80%
sf5m_b23	4 nm	35 nm	lens	19,0%	Çubuk	12%	35%

Tablo 2. Projenin ikinci yarısında denenen KN yapıları.

Kod	Yükseklik	Genişlik	Tip	x_Indiyum	Alaşım Profil	Tavlama	WL Galyum
sf5r_b1	3.2 nm	40 nm	disk	15,00%	İçli-Kabuk	35%	Yok
sf5r_b2	2.8 nm	40 nm	disk	15,00%	Çubuk	20%	Yok
sf5r_b3	2.8 nm	40 nm	disk	20,00%	Çubuk	20%	Yok
sf5r_b4	2.8 nm	35 nm	disk	20,00%	Çubuk	30%	Yok
sf5r_b5	2.8 nm	35 nm	disk	26,50%	Çubuk	15%	Yok
sf5r_b6	2.8 nm	30 nm	disk	20,00%	Çubuk	20%	Yok
sf5r_b7	2.8 nm	25 nm	disk	20,00%	Çubuk	20%	Yok
sf5r_b8	4 nm	35 nm	disk	33,00%	Çubuk	10%	Yok
sf5r_b9	6 nm	30 nm	disk	28,50%	Çubuk	10%	Yok
sf5r_b10	6 nm	30 nm	disk	33,00%	Çubuk	10%	Yok
sf5r_b11	6 nm	30 nm	disk	26,00%	Çubuk	25%	Yok
sf5r_b13	2.8 nm	35 nm	disk	23,00%	Çubuk	20%	Yok
sf5r_b14	2.8 nm	35 nm	disk	25,00%	Çubuk	25%	Yok
sf5r_b15	2.8 nm	35 nm	disk	20,00%	Çubuk	60%	Yok
sf5r_b16	2.8 nm	35 nm	disk	20,00%	Çubuk	75%	Yok
sf5r_b17	2.8 nm	35 nm	disk	20,00%	Çubuk	90%	Yok
sf5r_b18	3.5 nm	35 nm	disk	20,00%	Çubuk	60%	Yok
sf5r_b19	2.8 nm	35 nm	disk	14,00%	Çubuk	40%	Yok
sf5r_b20	2.8 nm	35 nm	disk	26,00%	Çubuk	60%	Yok
sf5r_b21	2.8 nm	35 nm	disk	27,00%	Çubuk	85%	Yok
sf5r_b22	2.8 nm	35 nm	disk	30,00%	Çubuk	85%	Yok
sf5r_b23	2.8 nm	35 nm	disk	29,75%	Çubuk	30%	Yok
sf5r_b24	2.8 nm	35 nm	disk	29,75%	Çubuk	7%	Yok
sf5r_b25	2.8 nm	35 nm	disk	29,75%	Çubuk	14%	Yok
sf5r_b26	2.8 nm	35 nm	disk	17,00%	Çubuk	15%	Yok
sf5r_b27	2.8 nm	35 nm	disk	20,00%	Çubuk	15%	75%
sf5q_b1	1.2 nm	35 nm	lens	55,00%	Çubuk	15%	85%
sf5q_b2	1.2 nm	35 nm	lens	25,00%	Çubuk (WL icine)	65%	90%
sf5q_b3	1.4 nm	35 nm	lens	15,00%	Çubuk (WL icine)	50%	90%
sf5q_b4	1.4 nm	35 nm	lens	15,00%	Çubuk (WL icine)	25%	90%
sf5q_b5	1.4 nm	35 nm	lens	40,00%	Çubuk	15%	85%
sf5q_b6	1.4 nm	35 nm	lens	15,00%	Çubuk (WL icine)	60%	90%
sf5q_b7	1.4 nm	35 nm	lens	15,00%	Çubuk (WL icine)	75%	90%
sf5q_b8	1 nm	20 nm	lens	40,00%	Çubuk	30%	85%
sf5q_b9	1.4 nm	35 nm	lens	17,00%	Çubuk (WL icine)	40%	90%
sf5q_b10	1.4 nm	35 nm	lens	12,00%	Çubuk (WL icine)	35%	90%
sf5q_b11	1.4 nm	35 nm	lens	10,00%	Çubuk (WL icine)	35%	90%
sf5q_b12	1.4 nm	35 nm	lens	9,00%	Çubuk (WL icine)	30%	90%
sf5_mr1	1.4 nm	35 nm	lens	15,00%	Mantar (WL icine)	50%	90%



Şekil 5. Kod numaraları Tablo I'de verilen KN'larından bazılarının ara kesitleri. Gri renkler indiyum, mor renkler galyum atomlarını göstermektedir; bu kesitlere arsenik atomları girmemiştir.



Şekil 6. Bir önceki şekil ile aynı; farklı KN'ları gösterilmektedir.

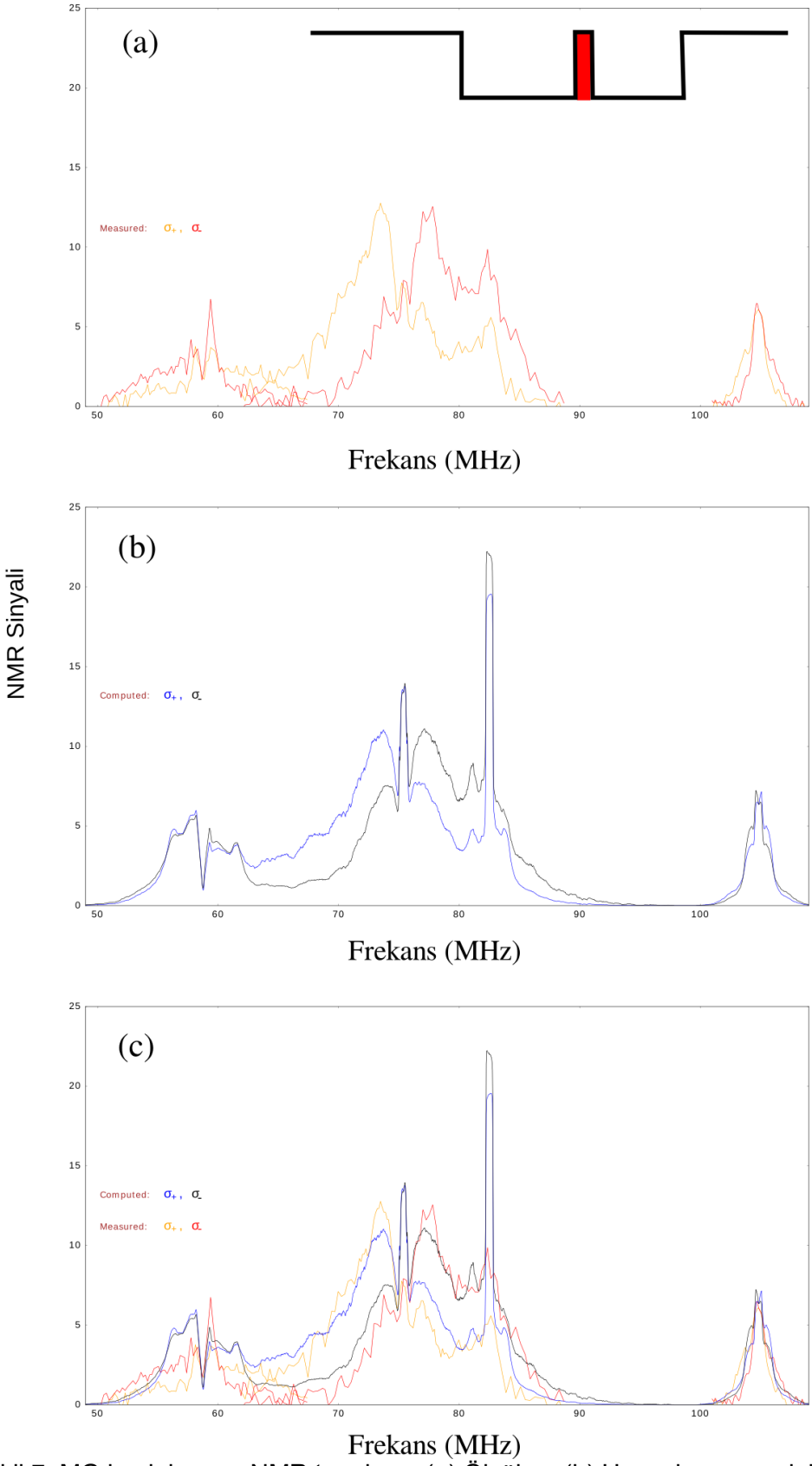
Yukardaki bu iki şekilde KN'sının gömülü olduğu ve yapıyı çevreleyen GaAs matris atomları kolay algılamayı sağlamak maksadıyla dışarıda tutulmuştur. Benzer şekilde, KN'sının üzerinde yer aldığı ıslatma tabakası (WL) da gösterilmemektedir. Tablo 1 ve 2'de tavlama (annealing) oranı olarak belirtilen sütun, KN içersindeki içli yapılarına göre indiyum atomlarının hangi yüzde ile galyum atomlarıyla yer değiştirdiğine karşılık gelmektedir. Bazı kesitlerde bu oran oldukça yüksek olduğu için, neredeyse rastgele bir dağılımda oldukları izlenimini vermektedir.

4.1.2 Merkez Geçiş Baskılı Ters İzgeler

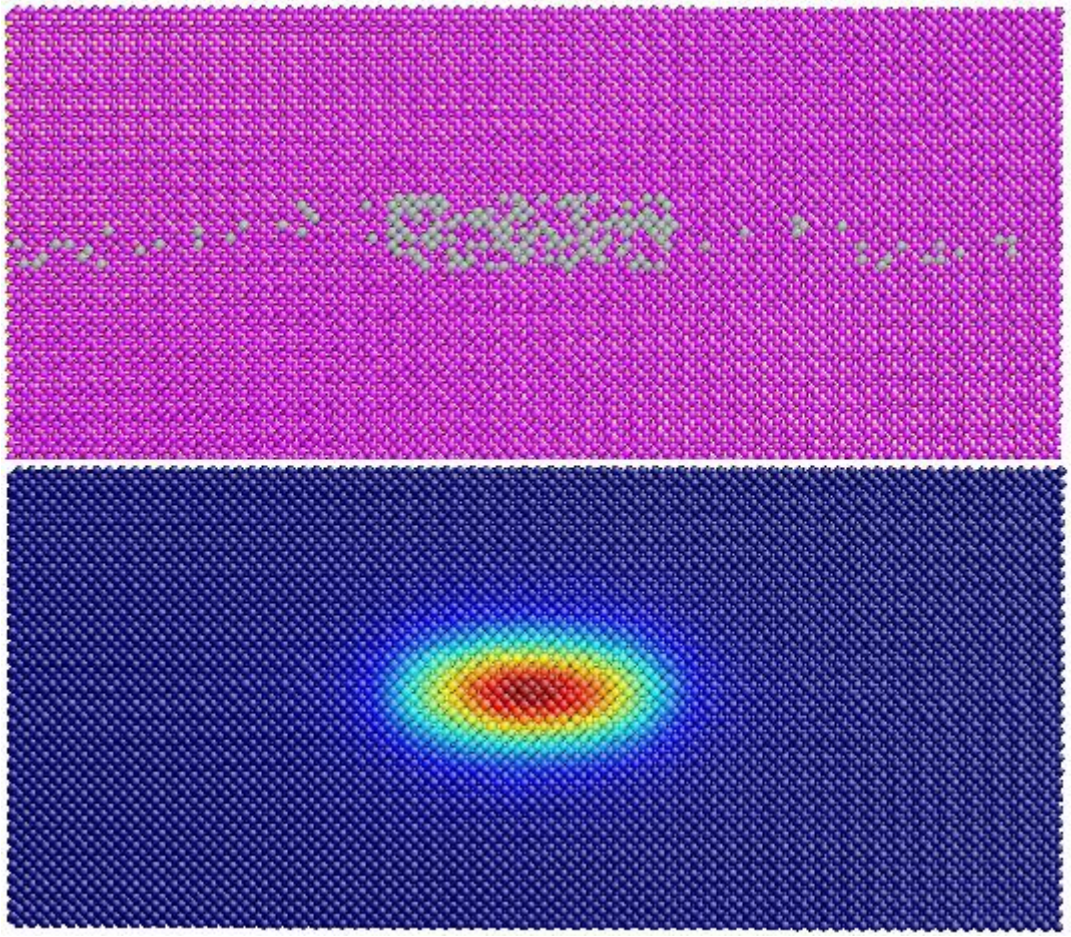
KN nanoyapısına dair en kritik bilgileri içeren uydu geçişleri (UG) üzerinedir. Fakat merkez geçişin (MG) baskın olması nedeniyle UG işareti arka planda kalmaktadır. Proje sürecinde Sheffield Üniversitesi'nden işbirliği yaptığımız Dr. E. A. Chekhovich ve doktora öğrencisi, NMR ters izgesinde UG'leri ön plana çıkaran bir yöntemle ölçüm yapmayı başarmış ve deneysel sonuçlarını bize iletmiştir. Kullanılan buna özel radyo frekans uyarımı Şekil 7(a)'nın içine gömülü olarak verilmektedir. Burada kırmızı ile boyalı bölge MG frekansına karşılık gelmekte ve bu geçiş bilinçli olarak doyurularak sıfırlanmaktadır.

Elimize geçen bu yeni ölçüm üzerine, model nanoyapımız üzerinde, burada yer veremeyeceğimiz çok miktarda denemelerimiz sonucunda en uyumlu izge sf5_mr1 kodlu modelimizden elde edilmiştir (Şekil 7(b)). Deneysel ve hesaplanmış model izgeleri arasında tatminkar uyum Şekil 7(c)'de görülmektedir. Buna ait model KN atomik yapısı ve tuzaklanan elektron dalga fonksiyonu Şekil 8'de yer almaktadır.

Bu uyumun daha da mükemmel hale getirilmesi üzerinde Sheffield Üniversitesi ile karşılıklı görüş alışverişimiz, yeni denemeler ile hala devam etmektedir. Kullandığımız S_{11} ve S_{44} elektrik alan gradyanı tensör parametrelerinin (Sundfors, 1974) daha modern ölçüm yöntemleriyle güncellenmesi öne çıkan bir adım olmuştur. Bu aşamanın tamamlanmasından sonra bulgularımız üzerine ortak bir yayın planlanmaktadır. Ama genel olarak projenin en önemli hedeflerinden olan, NMR verisinden nanoyapı çıkarımı başarıya ulaşmış durumdadır.



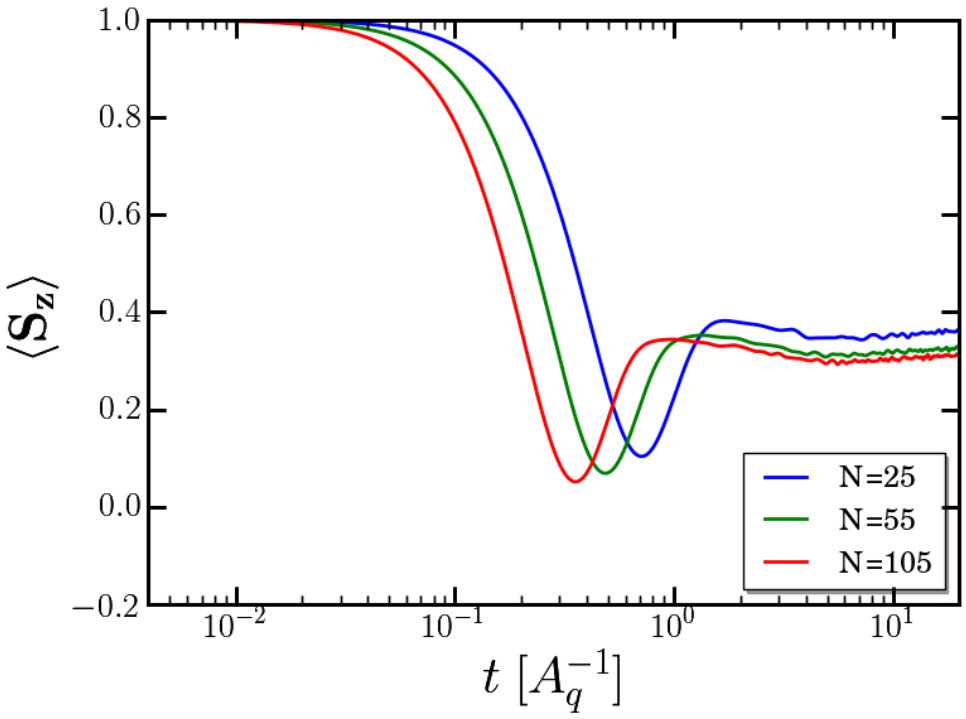
Şekil 7. MG baskılanmış NMR ters izge. (a) Ölçülen, (b) Hesaplanan model, (c) Ortak karşılaştırma.



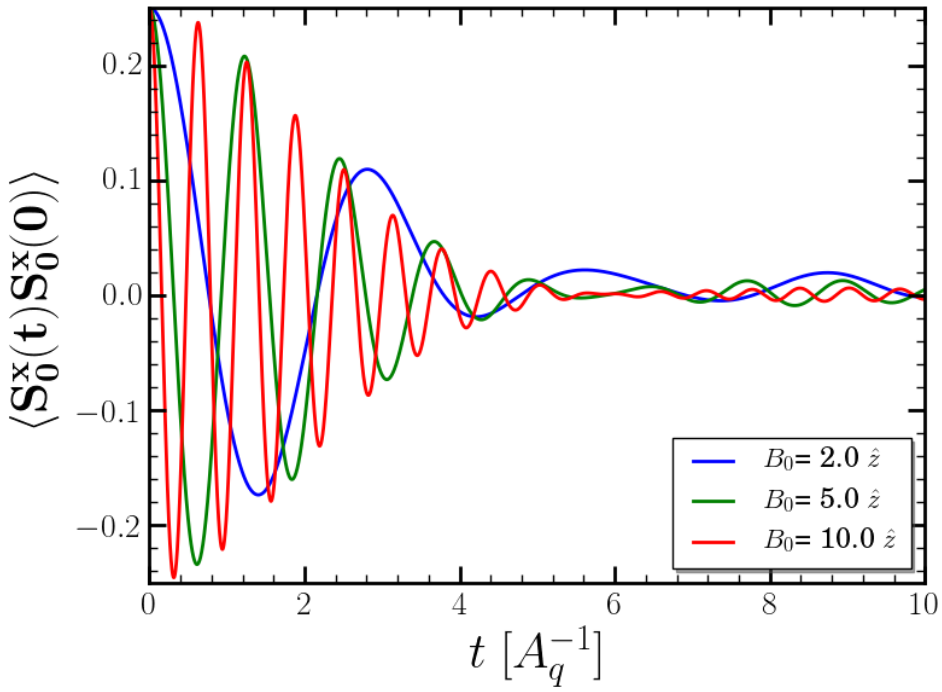
Şekil 8. MG baskılanmış NMR ters izgesi daha yukarda verilen model InGaAs KN'sının üst panelde (100) kristalografik kesitindeki atomik yapısı (mor atomlar: galyum, gri atomlar: indiyum), alt panelde elektron dalga fonksiyonu.

4.2 Yarı-klasik Benzetim ile Çekin Spin Hamam Devinimi

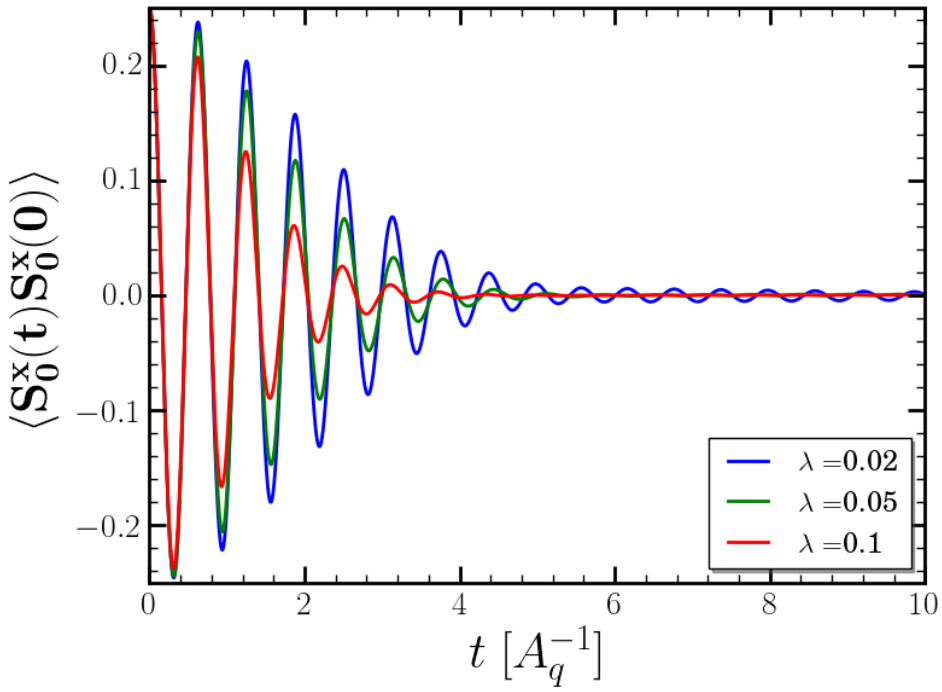
Projenin ilk yarısında Yarı-klasik Benzetim yöntemiyle Hamam Devinimi kısmı incelenmiştir. Bu yöntem Yarı-klasik olması nedeniyle Spin hamam devinimlerini anlamamıza kolaylık sağlamakla beraber kuantum mekaniksel yöntemlerin ilerletilmesinde lokomatif vazifesi görmüştür. Bulgularımız 1. Gelişme Raporunda bulunduğu gibi aşağıda da bir kısmına yer verilmiştir.



Şekil 9. Kutuplanmış farklı spin hamamları için merkez spinin devinimi, merkez spin $\frac{1}{2}$, etkin dış manyetik alan, $B = 1.0\hat{z}$, sönümlenme sabiti , $\lambda = 0$, dört kutup etkileşim sabiti, $\gamma_Q = 0$. En altyapı etkileşim sabitlerini ifade eden A_k 'lar $[-0.4, 0.6]$ arasında düzgün dağıtılmıştır.



Şekil 10. Farklı etkin dış manyetik alan B_0 değerleri için merkez spinin ilintisi. Merkez spin-$\frac{1}{2}$, $N = 19$ hamam spini, sönümlenme sabiti , $\lambda = 0$, dört kutup etkileşim sabiti, $\gamma_Q = 0$.

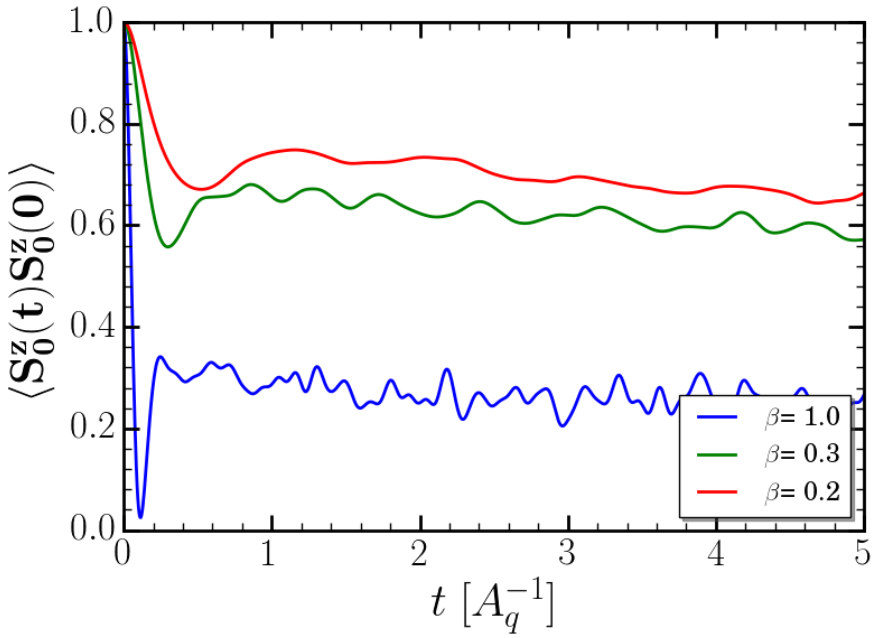


Şekil 11. Farklı sönümlenme sabiti, λ, değerleri için merkez spinin ilintisi. Merkez spin $\frac{1}{2}$, $N = 19$ hamam spini, etkin dış manyetik alan $B = 10.0\hat{z}$, dört kutup etkileşim sabiti $\gamma_Q = 0$.

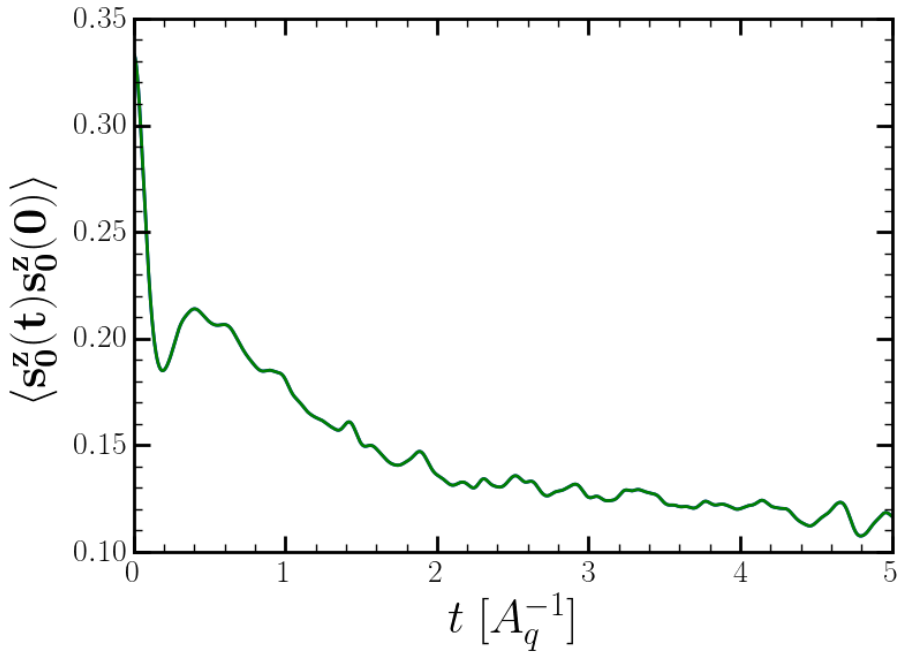
KN'larda merkez spin elektron yerine deşik (hole) olarak seçilirse en altyapı etkileşim sabitlerinin z bileşeni x ve y bileşenine eşit olmaz (Sinitsyn vd. 2012). Yani deşikler için elektronların aksine,

$$A_k^{\square} \neq A_k^{\perp}$$

durumu söz konusudur. $In_xGa_{1-x}As$ KN'ları göz önüne alındığında bu eşyönsüzlük önem arz etmektedir. Şekil 13'de farklı eşyönsüzlük oranları için merkez spinin ilintisi verilmiştir. Eşyönsüzlük oranı $\beta = \frac{A_k^{\perp}}{A_k^{\square}}$ olarak tanımlanmıştır. Ayrıca ilinti 1 'e ölçeklendirilmiştir.



Şekil 12. Farklı eşyönsüzlük β, değerleri için merkez spinin ilintisi. Merkez spin $\frac{1}{2}$, $N = 699$ hamam spini, etkili dış manyetik alan, $B = 0.0$, sönümlenme sabiti, $\lambda = 0.0$, dört kutup etkileşim sabiti $\gamma_Q = 0$.

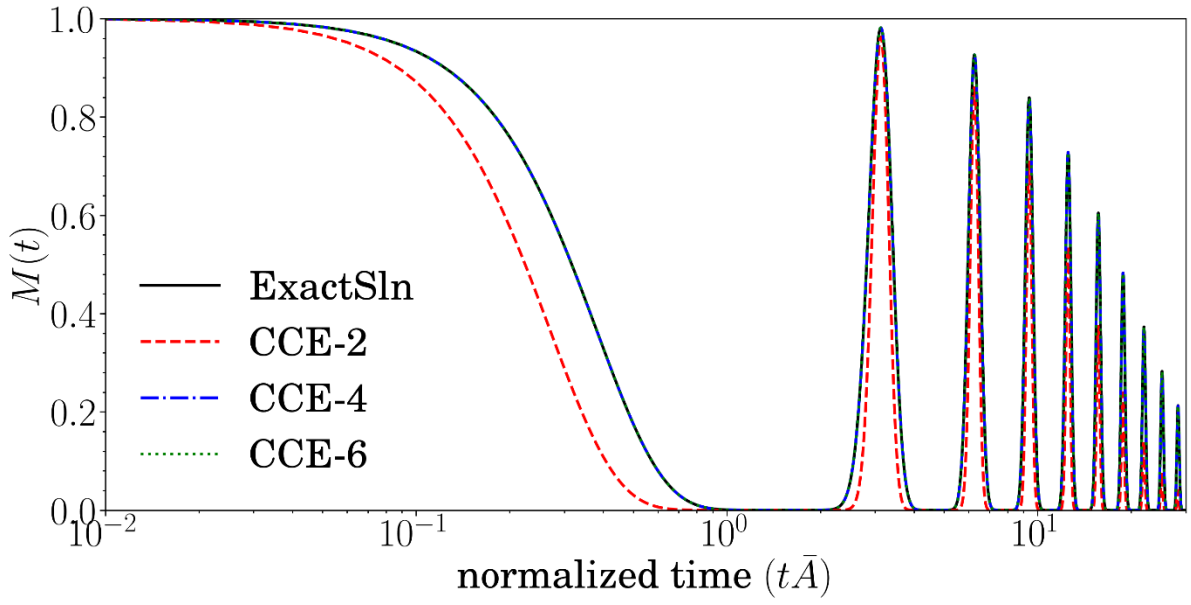


Şekil 13. Merkez spinin ilintisi $N = 699$ hamam spini, $B = 0.0$, $\lambda = 0.0$, $\gamma_Q = 1.0$. Merkez spinin uzunluğu $|S| = 1$ alınıp z bileşeni $S_z = 1/\sqrt{3}$ değerinde sabit tutulup diğer bileşenler birim çemberden rasgele olarak seçilmiştir.

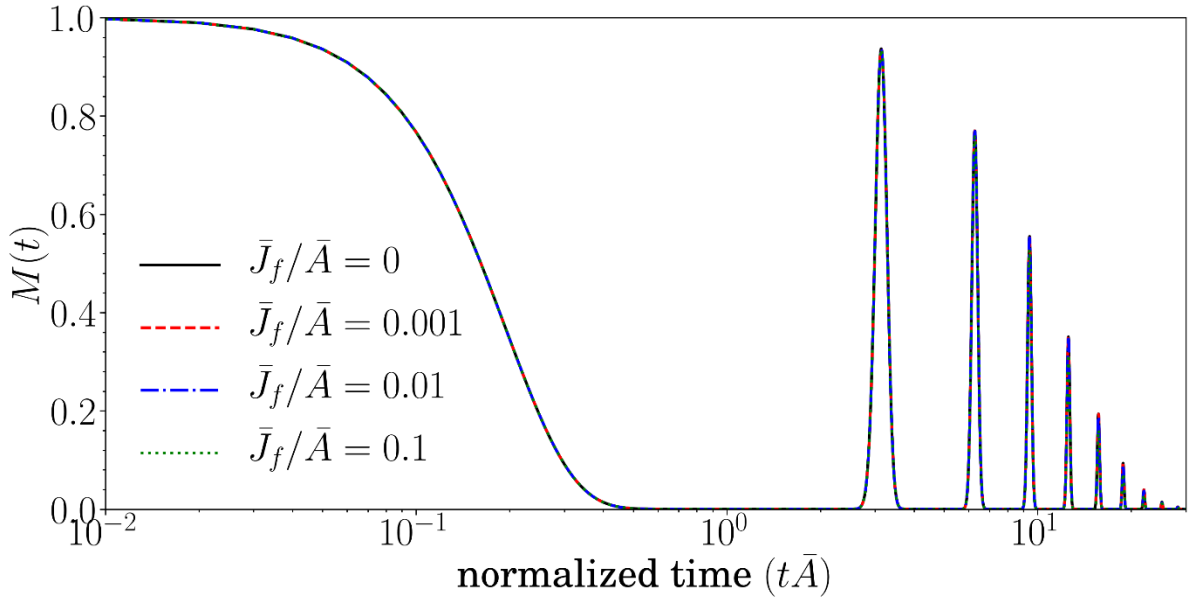
4.3 Kuantum Mekaniksel Çekin Spin Hamam Devinimi

Bu iş paketinde TİA algoritması üzerinden hesapladığımız kuantum mekaniksel sonuçlara yer verilmiştir. TİA'nın özellikle 3 ve üzeri topak açılımları için kesin çözümleri gayet yakınsadığı rahatlıkla görülebilir.

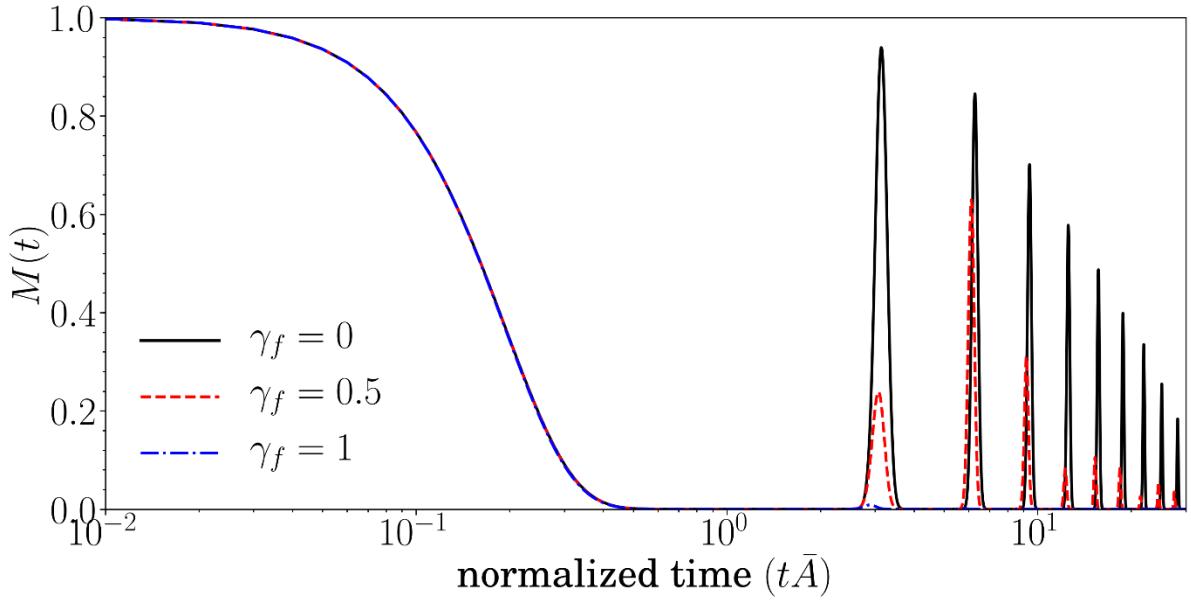
Şekil 14'de görüldüğü üzere TİA -2 açılımı kesin sonuçları yakalayamamış olmasına rağmen üst mertebedeki açılımlar rahatlıkla kesin sonuçları yakalayabilmektedir. Şekil 15 ise Farklı mertebedeki çift kutup etkileşim sabitleri için LY'nı göstermektedir. Dikkatli bakıldığında J_f değeri arttıkça tepeciklerin sönümlendiği görülebilir. Şekil 16 ise farklı γ_f rejimlerinlerinde LY'sını vermektedir. $\gamma_f = 0$ iken sadece alt-üst olma (flip-flop) terimleri aktifken $\gamma_f = 1$ durumunda bu terimlerin yanında alt-alt (flip-flip) ve üst-üst (flop-flop) terimleri de çekin spinleri arasında etki etmektedir ve $\gamma_f = 1$ durumu için eşevresizliğin çok hızlı etkisini gösterdiği aşikardır. Şekil 17 ise farklı spin- I değerleri için LY'sı verilmektedir. Çift kutup etkileşimlerinin etkisi spin-I değeri arttıkça daha kolay kutuplamaya sebep olması nedeniyle eşevresizlik süreci hızlanmaktadır.



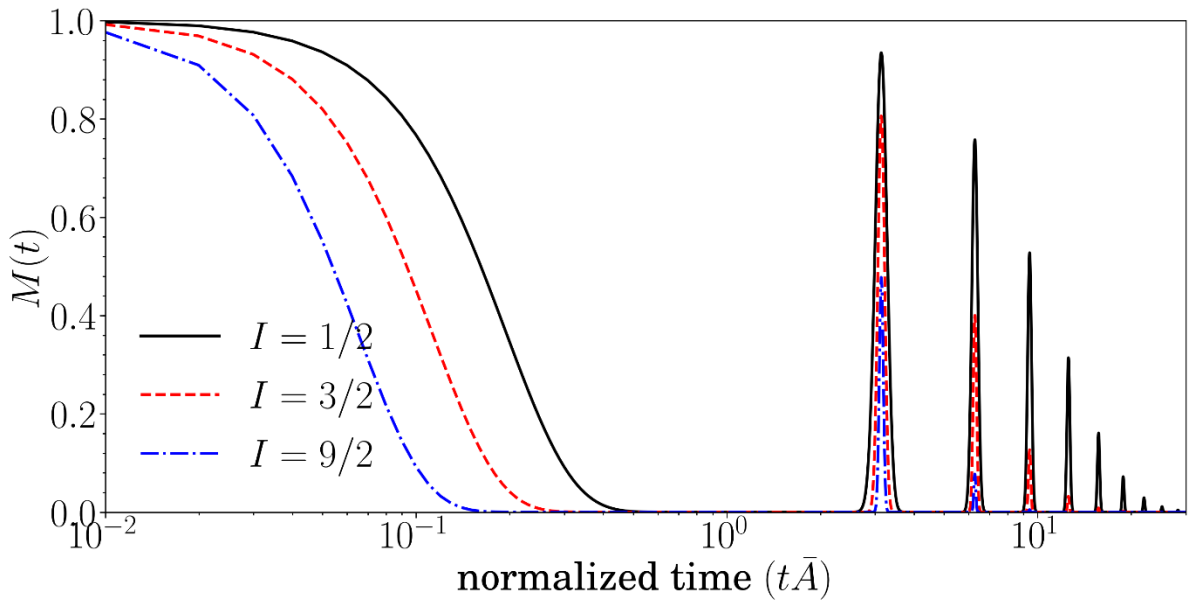
Şekil 14. TİA-2,4,6'nın kesin çözümlerle karşılaştırılması. Burada $N = 12$, $J_f = 0.1$ ve spin-$\frac{1}{2}$ olarak alınmıştır. Siyah eğri kesin sonuçları, kırmızı eğri TİA-2'yi, mavi eğri TİA-4'ü, yeşil eğri ise TİA-6'yi ifade etmektedir.



Şekil 15. Farklı çift kutup etkileşim sabitlerinin ortalama değerleri için LY'nın TİA-4'le çözümü. Burada $N = 50$, $\gamma_f = 0$ ve spin-$\frac{1}{2}$ olarak alınmıştır. Başlangıç spin durumları Bloch küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir.



Şekil 16. Farklı γ_f değerleri için LY'nin zamana göre devinimi. Burada $N = 50$, $J_f = 0.1$ ve spin-$\frac{1}{2}$ olarak alınmıştır. Başlangıç spin durumları Bloch küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir.



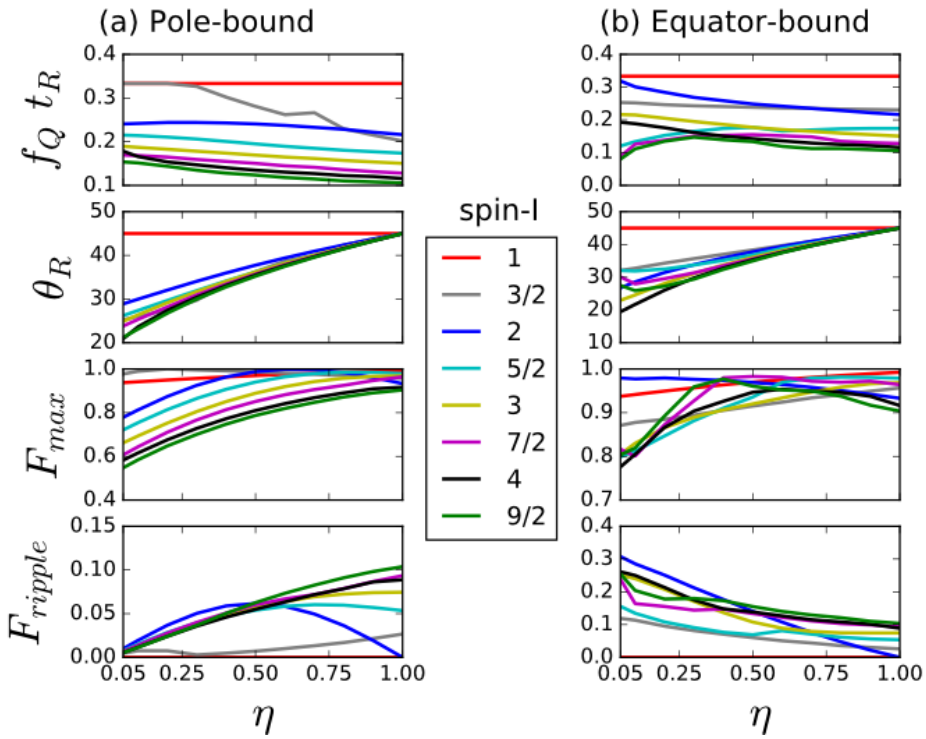
Şekil 17. Farklı I değerleri için LY'nin zamana göre devinimi. Burada $N = 50$, $J_f = 0.01$ ve $\gamma_f = 0$ olarak alınmıştır. Başlangıç spin durumları Bloch küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir.

4.4 Zamana Bağlı NMR Hesaplamaları

Yöntem kısmında açıklandığı üzere, bir çekin spininin dörtkutup etkileşimiyle evrilmesi esnasında en uygun an ve açıda RF darbesiyle döndürülmesiyle, dağılım ikiye ayrışarak Schrödinger Kedisi durumlarının kararlı halde elde edilebileceği bu projedeki önemli bulgularımızdandır. Bu kısımda sonuçlarımıza dair teknik ayrıntılar verilmektedir. Aşağıdaki çalışmalarımız Physical Review A dergisinde yayımlanmıştır (Bulutay, 2017).

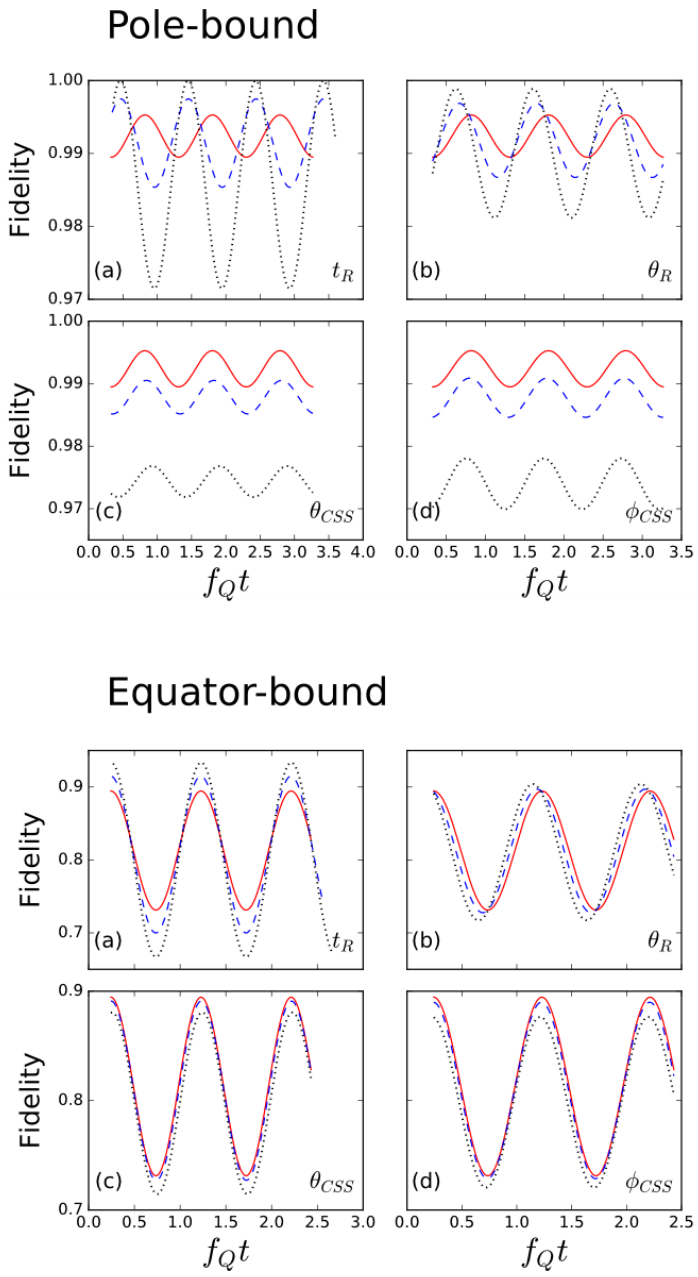
4.4.1 Sadakat Salınımları

Yöntem kısımında kullandığımız sadakat ölçütü verilmişti. Maksimum sadakati $F_{\max}$ ve onun oluşturduğu minimum dalgalanmayı F_{ripple} elde etmek için (optimum sadakat), döndürme işleminin doğru zamanda uygulanması gerekmektedir. Ayrıca, Şekil 18' de görüldüğü üzere sistemdeki çifteksenlilik azaldıkça, sadakat artmaktadır.



Şekil 18. (a) ve (b) 'de kutba-bağlı ve ekvatora-bağlı sistemler için döndürülme anları , ve açıları için hesaplanan ve değerlerinin, çifteksenlilik parametresine göre değişimi.

Aşağıda, Şekil 19'da görüldüğü üzere $I = 5/2$ olarak seçildiğinde sadakatin zamana göre periyodik olarak devinmektedir.



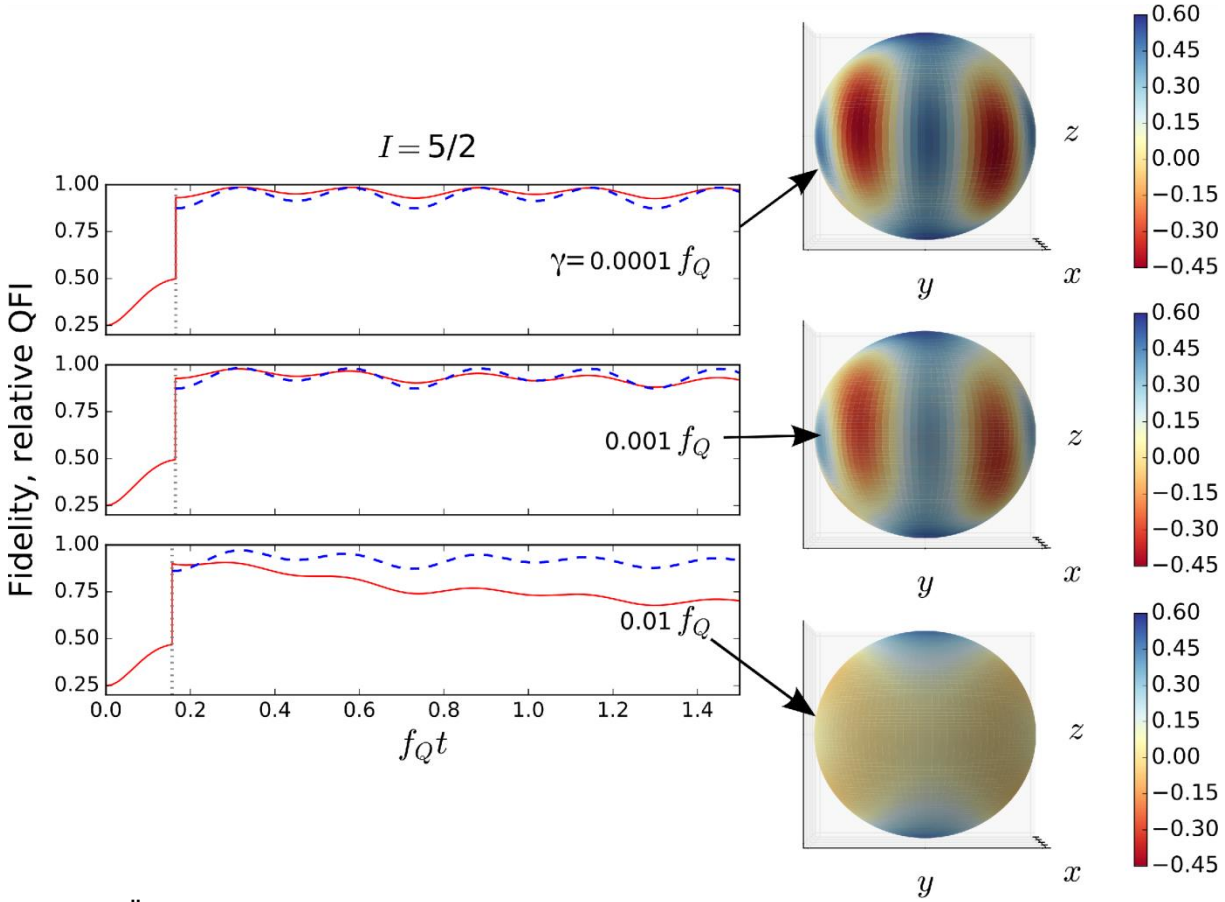
Şekil 19. $\eta = 1$ ve $I = 5/2$ için sadakatin kutba-bağlı ve ekvatora-bağlı sistemlerde zamana göre devinimi. (a) döndürülme anı, (b) döndürülme açısı, (c) eşevreli spinin polar uzantıları ve (d) eşevreli spinin azimutal uzantıları. Burada kırmızı çizgiler optimum sadakat değerleri, mavi ve siyah kesikli çizgiler ise optimum sadakat değerlerinden sırasıyla, %5 ve %10 sapma ile hesaplanmıştır.

4.4.2 Eşevresizlik Etkileri

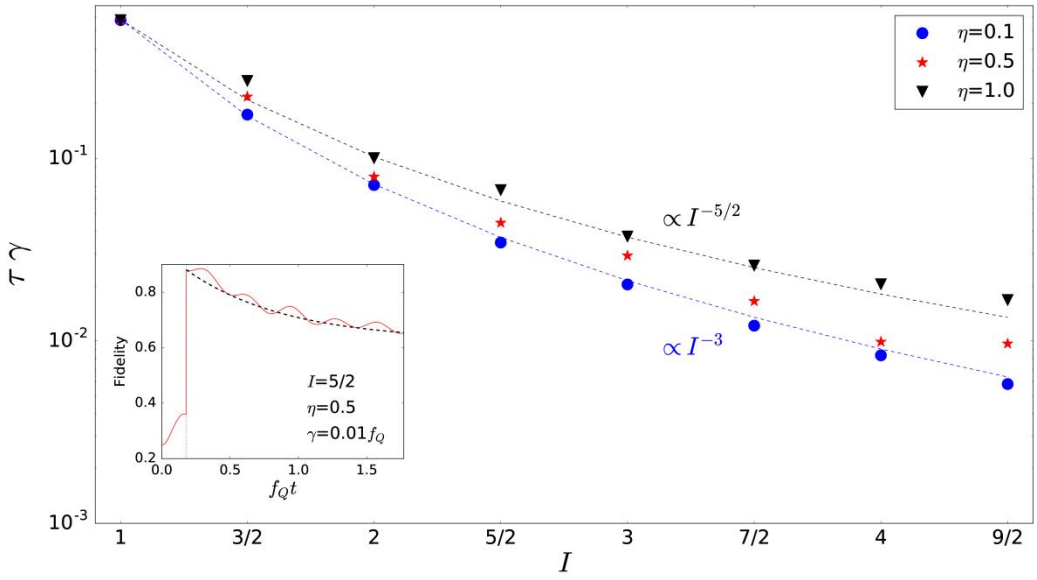
Şekil 20 sol panelde, I=5/2 spinin kutba bağlı kedi durumları için farklı $\gamma = 1/T_2$ faz kaybı oranları için sadakatindeki (fidelity) devinim gösterilmektedir. İzleneceği üzere, faz kaybı oranı arttıkça (orta ve alt grafikler) sadakat ideal değerinden ciddi derecede sapmaktadır.

Şekil 20'nin sağ panelinde ise karşılık gelen spin Wigner dağılımları bulunmaktadır; benzer olarak yüksek faz kaybı durumunda, her iki kutup arasındaki girişimden kaynaklanan negatif desen yok olmakta, ve klasik bir dağılıma dönüşmektedir. Yani beklendiği gibi çevre ile etkileşim kuantum mekaniksel spin kedisi dağılımının eşuyumlu üst üste binme halini bozmaktadır.

Hesapladığımız diğer önemli bir nicelik ise, kedi durumları için sadakatin spin-I sayısına göre ne şekilde ölçeklendiğidir. Şekil 16'da bu sonucumuz, üç farklı çifteksenlik (η) durumu için gösterilmektedir. Buna göre sadakat gevşeme oranı ($1/\tau$), η değerine bağlı olarak I^3, $I^{5/2}$ arasında yer almaktadır. Bilgimiz dahilinde, literatürde bu yönde bir hesap mevcut değildir.



Şekil 20. Üç farklı faz kaybı oranı (γ) için kutba bağlı spin kedi durumlarında, sadakatin evrimi (sol panel) ve spin Wigner dağılımındaki değişim.



Şekil 21. Spin I=5/2 kedi durumları için sadakat gevşeme oranının (1/τ), η değerine bağlı olarak spin I değerine göre ölçeklenmesi.

4.5 Eşevresizlik Oluşumunun Nicel Olarak Karekterizasyonu

Bu bölümde arkaplan çekin spinleri ile KN elektronuna ait bir merkez spinin enaltyapı (hyperfine) etkileşimi sonrası oluşan eşevresizlik süreçleri (Cucchietti vd., 2007) incelenmektedir. Bu kısımdaki bulgularımız Physical Review B dergisine gönderilmiş ve hakem incelemesi altındadır (Güldeste ve Bulutay, 2018).

4.5.2 Saf Fazsızlaşma Modeli (Pure Dephasing Model)

Projenin üçüncü Gelişme Raporunda Topak İlinti Açılımı (TİA, CCE) algoritmasının doğrulanabilmesi için yaptığımız Jordan-Wigner dönüşümü metodu ele alınmıştı. Fakat, bu çözüm sadece Spin-1/2 zincirlerinin zemin halleri için Loschmidt Yankı'sını (LY) vermektedir. Bu nedenle, TİA algoritmasını GaAs Kuantum Noktaları (KN) gibi yüksek spin değeri taşıyan ($I \geq 1$) gerçekçi simulasyonlarda, test etmek amacıyla, herhangi bir Spin -I değeri ve başlangıç hali için geliştirmiş olduğumuz kesin çözüm önerisi bu raporda ayrıntılı bir şekilde verilecektir. Bu çözüm, En altyapı etkileşiminin sadece $\hat{z}$ yönünde dahil edildiği bir model olup (Pure Dephasing Model) uzunsal en altyapı etkileşiminin önemsenmediği (off-resonance) süreci için (data storing) uyarlanmıştır. Bu modelin en büyük avantajı Dörtkutup etkileşimi gibi (Quadrupolar Interaction) tüm tek parçacık etkileşimleri için kesin çözüm elde etme imkanı sağlayabilmesidir. Buna ek olarak, çift kutup etkileşimlerini benzetmeye yarayan faz-dönmeli kanal (Phase-Flip Channel) Lindblad Egemen denklemine uyarlanarak incelenmiştir.

Saf Fazsızlaşma Modeli için Hamiltonyen aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$\hat{H} = \hat{H}_{+} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \hat{H}_{-} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|,$$

Burada,

$\hat{H}_{\pm} = \pm\sum_i A_i \hat{I}_i^z$ olup, $\hat{I}_i^z$ i'inci çeki spinin $\hat{z}$ eksenine olan izdüşüm, A_i en altyapı etkileşim sabiti olarak tanımlanabilir. Başlangıç halinde, $|\psi\rangle = C_{+}|\uparrow\rangle + C_{-}|\downarrow\rangle$ şeklinde ifade edilebilen merkez spin (MS), yukarıdaki Hamiltonyen altında evrilmesi neticesinde çekin spin hamamı ile dolaşıklı hale gelir. Bu evrede MS ve spin hamamının hali bir bütün şeklinde aşağıdaki gibi ifade edilebilir,

$$|\Psi(t)\rangle = C_{+}|\uparrow\rangle \otimes |B_{+}(t)\rangle + C_{-}|\downarrow\rangle \otimes |B_{-}(t)\rangle.$$

Burada, $B_{\pm}(t)$ spin hamamının $\hat{H}_{\pm}$ hamiltonyeni altında t anındaki durumunu ifade etmektedir. Yukarıda ifade edilen dolaşıklık neticesinde, MS'in üzerindeki bilgi spin hamamına sızar. Sızan bilgi eşevrelilik kaybı (qubit coherence) olarak nitelendirilip, şu şekilde ayırt edilebilir,

$$L(t) = \langle B_{-}(t) \mid B_{+}(t) \rangle = \langle B_0 \mid e^{i\hat{H}_{-}t} e^{-i\hat{H}_{+}t} \mid B_0 \rangle,$$

Buradan yola çıkarak LY, $M(t) = \mid L(t) \mid^2$ şeklinde kolayca hesaplanabilir. Başlangıç Hamam hali, eşevreli spin hallerinin tensör çarpımı şeklinde yazılabilir,

$$\mid B_0 \rangle = \mid B_{\pm}(t=0) \rangle = \otimes_{i=1}^{N} \mid \theta_i, \phi_i \rangle,$$

$\mid \theta_i, \phi_i \rangle$ ise spin-I için,

$$\mid \theta, \phi \rangle \; = \; \sum_{m=-I}^{m=I} \begin{pmatrix} 2I \\ I+m \end{pmatrix}^{1/2} \left[\cos(\theta/2)\right]^{I+m} \left[\sin(\theta/2)\right]^{I-m} e^{-i(I-m)\phi} \mid m \rangle.$$

olarak ifade edilebilir. Denklemin sağ tarafindaki θ ve ϕ küresel açıları ifade etmektedir. O halde Saf Fazsızlaşma Modeli için $L(t)$ her bir hamam spininin bireysel olarak evrilmesinin çarpımları şeklinde ifade edilebilir. Yani,

$$L(t) = \prod_{i=1}^{N} \langle \theta_i, \phi_i \mid e^{-i2A_i \hat{I}_i^z t} \mid \theta_i, \phi_i \rangle,$$

halini alır. Yukarıdaki ifade açıldığında,

$$L(t) = \prod_{i} \Big\{ \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} e^{-i2A_i m_i t} \Big\}, \quad (4.1)$$

şeklinde yazılabilir. Burada, $W_i m_i$ açıya bağlı ağırlık fonksiyonları olup,

$$W_i^{m_i} = \begin{pmatrix} 2I_i \\ I_i + m_i \end{pmatrix} \left[\cos(\theta_i/2)\right]^{2(I_i+m_i)} \left[\sin(\theta_i/2)\right]^{2(I_i-m_i)},$$

halinde ifade edilir. (4.1) Nolu denklem saf fazssızlaşma modeli için en genel ifadedir. Herhangi bir sınırlamaya maruz kalınmadan büyük spin hamamları, yahut büyük spin-I değerleri için, LY bulunmasında kesin bir çözüm önerisidir.

Buna ek olarak LY'nın görünge analizi (Power Spectra) hem teorik hemde deneysel bir çok çalışmaya ışık tutabileceği için önem arz etmektedir. LY nin güç görüngesi (4.1) no'lu denklemin Fourier dönüşümün hesaplanmasıyla elde edilebilir. Burada ilk adım (4.1) no'lu denklemin aşağıdaki gibi yazılmasıyla başlar,

$$L(t) = \prod_i L_i(t),$$

Burada $L_i(t)$, denklem (4.1)'den de anlaşılabileceği üzere,

$$L_i(t) = \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} e^{-i2A_i m_i t}, \quad (4.2)$$

dir. Denklem (4.2)'e bakıldığında, $L(t)$'nin Fourier dönüşümü her bir $L_i(t)$ teriminin bireysel olarak Fourier dönüşümlerinin kıvrımı (convolution) olarak yazılabileceği kolayca görülebilir. Yani,

$$L(f) = L_1(f) * L_2(f) * \cdots * L_N(f), \quad (4.3)$$

O halde bir her bir $L_i(t)$ teriminin Fourier dönüşümü şu şekilde hesaplanır,

$$L_i(f) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi f} \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} e^{-i2A_i m_i t} dt,$$

$$= \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi f} e^{-i2A_i m_i t} dt,$$

$$= \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} \delta(f + A_i m_i / \pi).$$

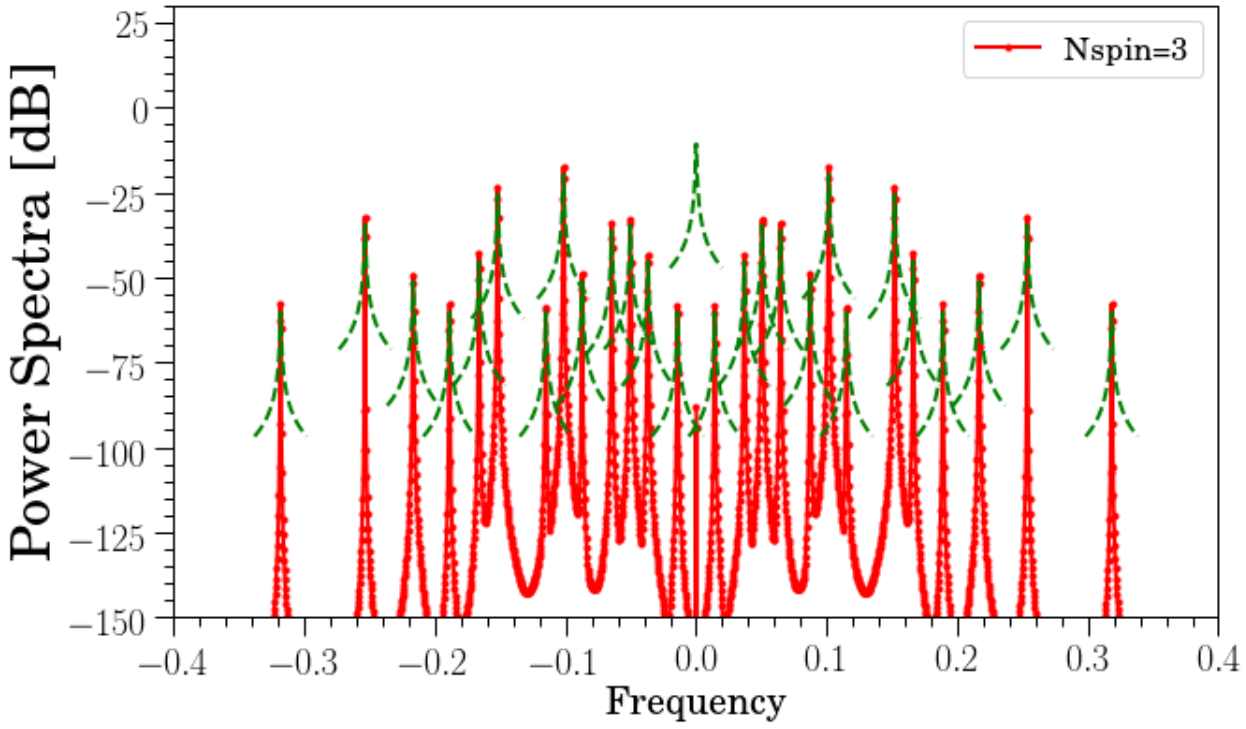
Bu ifade denklem (1.6)'da yerine yazıldığında,

$$L(f) = \sum_{m_1, m_2, \ldots, m_N} \left(\prod_{i=1}^{N} W_i^{m_i}\right) \delta\left(f + \frac{1}{\pi} \sum_{i}^{N} A_i m_i\right),$$

halini alır. O halde LY ($M(f) = L(f) * \left[L(f)\right]^{*}$),

$$M(f) = \sum_{\substack{m_1, m_2, \ldots, m_N, \\ m_{1'}, m_{2'}, \ldots, m_{N'}}} \left(\prod_{i=1}^{N} W_i^{m_i} W_i^{m_{i'}} \right) \delta \left[f + \frac{1}{\pi} \sum_{i}^{N} A_i (m_i - m_{i'}) \right],$$

şeklinde ifade edilebilir. Şekil 22'de yukarıdaki denklem üzerinden hesaplanan analitik ve hesaplamalı karşılaştırılmasıdır. Burada dirac delta fonksiyonu çok dar bir Lorentzel olarak alınmıştır.



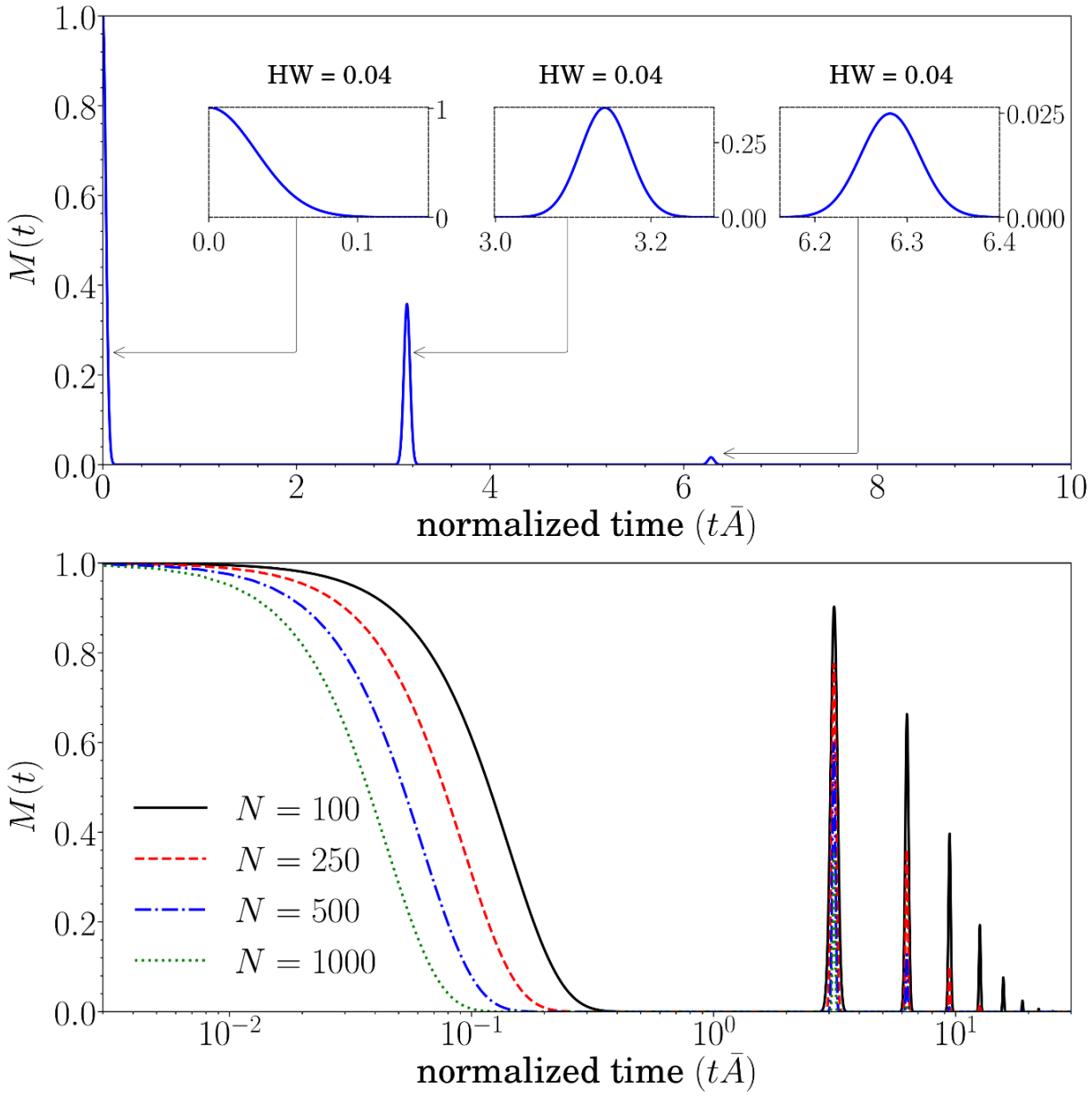
Şekil 22. LY'nın güç görüngesinin analitik ve nümerik karşılaştırması.

Gerçekçi durumların LY'na geçmeden önce, temel değişkenlerin sistemi nasıl etkilediğini anlamak önem arz etmektedir. Aşağıda bulunan şekiller için farklı normalizasyon türleri seçilebilmesine rağmen, biz normalizasyon durumumuzu zaman ve frekans için sırasıyla, $\bar{t} = t\bar{A}$ ve $\bar{f} = f / \bar{A}$ olarak almış bulunmaktayız, burada $\bar{A}$ değeri en alt yapı etkileşim sabitlerinin ortalama değerini ifade etmektedir ($\bar{A} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} A_i$).

Bu çerçevede gösterebileceğimiz en basit durumlardan biri $N = 1000$,spin-$1/2$, için LY'nın zamana göre devinimini veren şekil 18'in üst panelidir. Burada ve diğer şekiller için çekin spin durumları eşevreli spin hallerinden seçilmiştir. En alt yapı etkileşim sabitlerinin uzaysal

bağımlılığı dolayısı ile bu sabitlerin birbirinden farklı olması tabii bir durumdur. Şekil 23 için bu farklılık maksimum $0.025\bar{A}$ değeri kadar alınmış olup tüm çekin spinler için bu aralıkta düzgün dağıtılmıştır. Şekil 23 (üst) den'de anlaşılacağı üzere LY ilk olarak tamamen faz kaybına uğramış fakat, sonraki zamanlarda azalarakta olsa tekrar fazlanarak sıfırdan farklı bir değerlere ulaşmayı başarmıştır. Bu evrelerdeki tepecikler aynı yarı kalınlığa sahip olan gaussian'lardan oluşmaktadır. Şekil 23 (alt)'da ise farklı spin hamam büyüklüklerin LY'na etkisi ele alınmıştır. Görüldüğü üzere spin hamamı büyüdükçe faz kaybı daha erken meydana gelmektedir. Bu faz kaybı ve fazlanma süreçleri tamam periyodik olup $\cos(\bar{t})^{NI}$ formundadır.

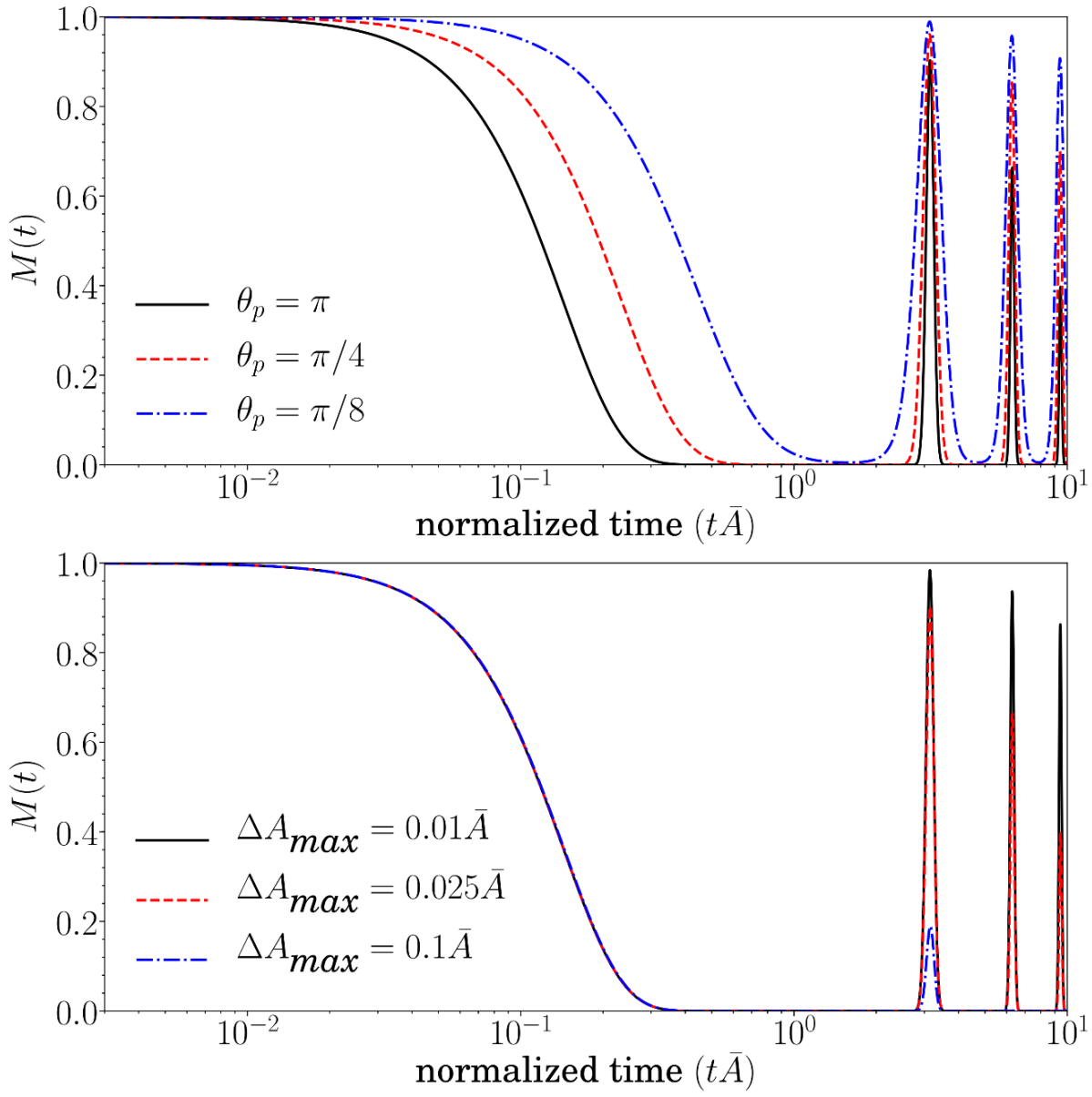
Eşevrelilik zamanı ve tepecik büyüklükleri Şekil 24'de gösterildiği üzere başlangıç hamam kutuplanmasına bir hayli bağlıdır. Her bir çekin spinin başlangıç hali eşevreli spin halleri üzerinden seçilmiş olup θ_i açısıyla merkezlenmiş olup bu açı θ_p açısıyla belirlenen bir koninin içinden seçilmektedir. Polarize olmayan bir hamam için θ_p açısı π değerine yaklaşmaktadır. Bu durum $t=0$ anında sıfırdan farklı olan Overhauser alanın zaman geçtikçe sistem içerisinde yok olmadan devam eder. Şekil 24'ün üst panelinde de görüldüğü üzere başlangıç hamam polarizasyonunun artması geri fazlanma evresindeki tepeciklerin büyüklüğünün artmasına ve fazsızlaşma evresinde daha geniş yarı kalınlıklara neden olmaktadır. Şekil 24'nin alt panelinde ise en altyapı etkileşim sabitlerinin farklı genişlikte dağıtılması sonucu elde edilen sonuçlar sunulmaktadır. Burada A_{max} ektileşim sabitleri arasındaki maksimum sapmayı ifade etmektedir. Şekil 23'de bahsi geçen $\cos(\bar{t})^{NI}$ ifadesi gereği etkileşim sabitlerinin ortalama değerinde bir değişim olmadığı için fazsızlaşma evresindeki yarı kalınlıklarda da bir değişim gözlemlenmemiştir. Buna karşın tekrar fazlanma evresi içinde tepeciklerin yükseklikleri artmıştır.



Şekil 23. (üst) $N=1000$ için Loschmidt Yankısı. İç şekiller yankıların yarım kalınlığını (half width) göstermektedir.(alt) Farklı değerlerinin LY'ye etkisi. Tüm durumlarda, $I=1/2$, $\Delta A_{max}=0.025\bar{A}$ ve hamamın başlangıç hali küre üzerinden düzgün dağılımla seçilmiştir.

Şekil 25'de ise LY'nın çekin spin quantum özdeğeri olarak anılan I parametresine bağlılığı anlaşılmaya çalışılmıştır. I değeri $1/2$'den $9/2$'ye kadar artırıldıkça özdeğer görüngesi daha yoğun bir hal alır ve her bir çekin spin daha klasik davranmaya başlar. Bu nedenle spin-I değerinin büyümesi fassızlaşma evresinin daha erken vukuu bulmasına neden olduğu gibi fazlanma evresindeki büyüklüğün küçülmesinede neden olur. Şekil 25'nin üst paneli aynı zamanda bir iç şekili de barındırmaktadır. Bu iç şekil aslında spin-I eğri ailesinin tek bir eğri

üzerinde normalize edilebileceğini göstermektedir. Bu normalizasyon şartı, eğrilerin gaussal doğası nedeniyle iç şekilde de görüldüğü üzere $t\bar{A}\sqrt{I}$ şeklinde ifade edilir. Şekil 25'in alt paneli LY'nin güç görüngesini ifade eder. Burada asıl amaç görünge genişlemesini gözlememlemek olduğu için, tüm eğriler düşey eksende 0 dB'ye kaydırılmıştır. Güç görüngeside $\sqrt{I}$ normalizasyonunu doğrular nitelikte genişlemelere yer vermektedir.



Şekil 24. (üst) $t=0$ anında çekin spin kutuplanmasının (θ_p) LY'na etkisi. (alt) En alt yapı etkileşim sabitininin seçilme aralığının LY'na etkisi (ΔA_{max}); Başlangıç çekin spin halleri Bloch küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir. Tüm durumlarda $N=100$, $I=1/2$ olarak alınmıştır.

Şekil 23-25 ‘de çekin spinlerle MS’in sadece en alt yapı etkileşimi üzerinden elde edilmiştir. Daha gerçekçi modellller elde etmek için başka etkileşim türleride saf fassızlaşma modeline eklenebilir veya bu etkiyi gösteren faz dönmeli kanal metodu eklenebilir. Bu model Lindblad Egemen Denklem (Master Equation) yaklaşımında (Nielsen ve Chuang, 2000), çekin spininin evrimi

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\rho}_S(t)\right] + \sum_{m=1}^{2I}\left[\hat{L}_m \hat{\rho}_S(t)\hat{L}_m^{\dagger} - \frac{1}{2}\left\{\hat{L}_m^{\dagger}\hat{L}_m, \hat{\rho}_S(t)\right\}\right],$$

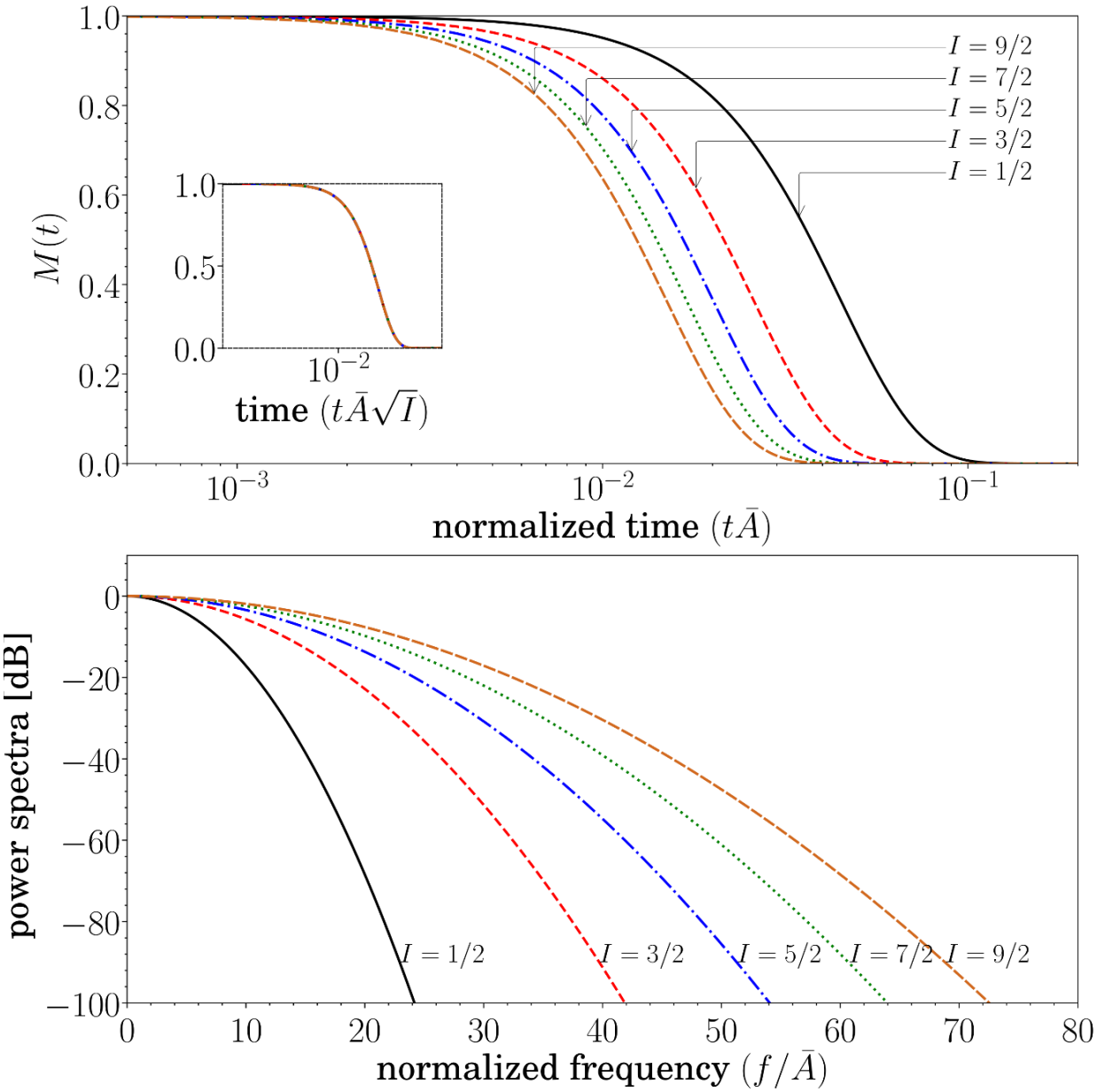
şeklinde hesaplanır. Burada, $\hat{\rho}_S, \hat{L}_m$ sırasıyla çekin spini yoğunluk operatörü ve Lindblad çökme operatörüne karşılık gelmektedir. Bizim ilgilendiğimiz çevre koşulu olan faz dönmeli kanaldaki spin-I için bu operatör,

$$\hat{L}_m = \sqrt{\binom{2I}{m}\left(\frac{1-e^{-\gamma}}{2}\right)^m \left(\frac{1+e^{-\gamma}}{2}\right)^{2I-m}}\ \hat{I}_z^m,$$

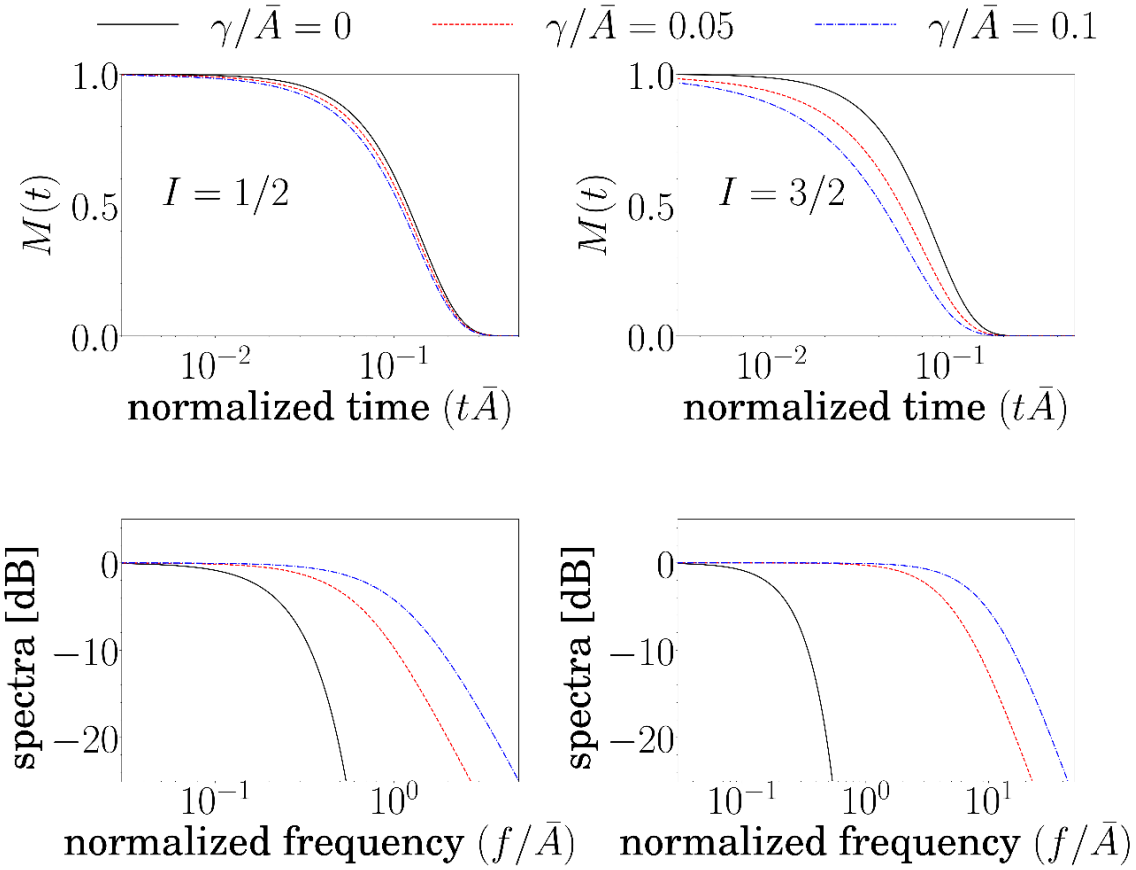
şeklindedir, ve ayrıca $\hat{I}_z$ z-yönlü spin açısal momentum operatörüne ve $\gamma = 1/T_2$ faz kaybı oranını göstermektedir. Çekin spinli yoğunluk operatörü üzerinden LY’sı,

$$M(t) = \prod_{i=1}^{N} \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_-^i(t)\hat{\rho}_+^i(t)\right),$$

Olarak ifade edilebilir. Burada $\rho_{\pm}^i$ i’inci çekin spin için $H_{\pm}$ hamiltonyeni altında hesaplanmış çekin spin yoğunluk matrisini ifade etmektedir. Faz dönmeli kanal spin yoğunluk matrisinin köşegen olmayan terimlerinin sönümlenmesine neden olarak eşevresizlik sürecine katkıda bulunur. Şekil 26’da spin $-1/2$ ve spin $-3/2$ çekin spin hamamları faz dönmeli kanalın etkisi altında karşılaştırılmıştır. LY faz dönmeli kanalın yokluğunda gaussal bir profile sahipken sıfırdan farklı değerler için LY üstsel bir davranışta geliştirmeye başlamaktadır. Bu nedenle güç görüngesi Gaussiyenden Voigt profiline doğru bir geçişe sahiptir. Eğere faz dönme oranı sistemi tamamen baskılıyacak kadar büyük seçilirse güç görüngesinin tamamen Lorentsel bir profile sahip olacağı görülecektir.



Şekil 25. Farklı spin-I değerlerinin karşılaştırılması. (üst) Zaman eksenindeki davranış; Burada iç şekil farklı bir normalizasyonda tüm spin- eğrilerinin üst üste oturabileceğini göstermektedir. (alt) Frekans ekseninde ki davranış. Tüm durumlarda $N = 1000$, $\Delta A_{max} = 0.025\bar{A}$, olarak alınıp başlangıç hamam durumları Bloch Küresi üzerinden düzgün bir dağılımla seçilmiştir.



Şekil 26. Faz dönmeli kanalın LY'na etkisi, (sol) spin-$1/2$, (right) spin-$3/2$. $N=100$, $\Delta A_{max}=0.3\bar{A}$. Başlangıç hamam spinleri Bloch küresi üzerinden düzgün dağılımla seçilmiştir.

Tüm bu bilgilerin ışığında LY sına bu temel parametreleri içeren bir ifade ile yaklışık olarak tahmin edilebilir, bu tahmin,

$$M(\bar{t}) \sim \exp\left[-NI\left(\alpha_p \sin^2(\bar{t})+\beta_p\sigma^2\bar{t}^{\,2}\right)-\Gamma\bar{t}\right],$$

şeklindedir. Burada N çekin hamam spini, I spin kuantum numarası, σ en altyapı etkileşim sabitlerinin standart sapması, α_p ve β_p başlangıç spin polarizasyonuna bağlı parametreler olup Γ hem faz dönmeli kanal oranına hem de başlangıç spin polarizasyonuna bağlı bir değişkendir. Bu ifade yeterince büyük çekin spin hamamları için, farklı büyüklükler, farklı spin-I değerleri , en altyapı sabiti dağılımı gibi LY'nın temel bağımlılıklarını özetlemesi itibarı ile önem arz etmektedir.

4.5.3 Gerçekçi Kuantum Nokta Modelleri

Bu temel prensiplerin ışığında gerçekçi bir KN için LY hesaplanabilir. Biz örnek olarak hem küçük ve büyük hamam hesabı olarak sırasıyla SiP kusur merkezini ve GaAs Kuantum noktasını seçmiş bulunmaktayız. En alt yapı etkileşim sabitlerinin uzaysal dağılımını belirleryen elektron zarf dalga fonksiyonu,

$$\Psi(r_i) = \Psi(0)\exp\left(-\frac{r_i^2}{2l_0^2}\right),$$

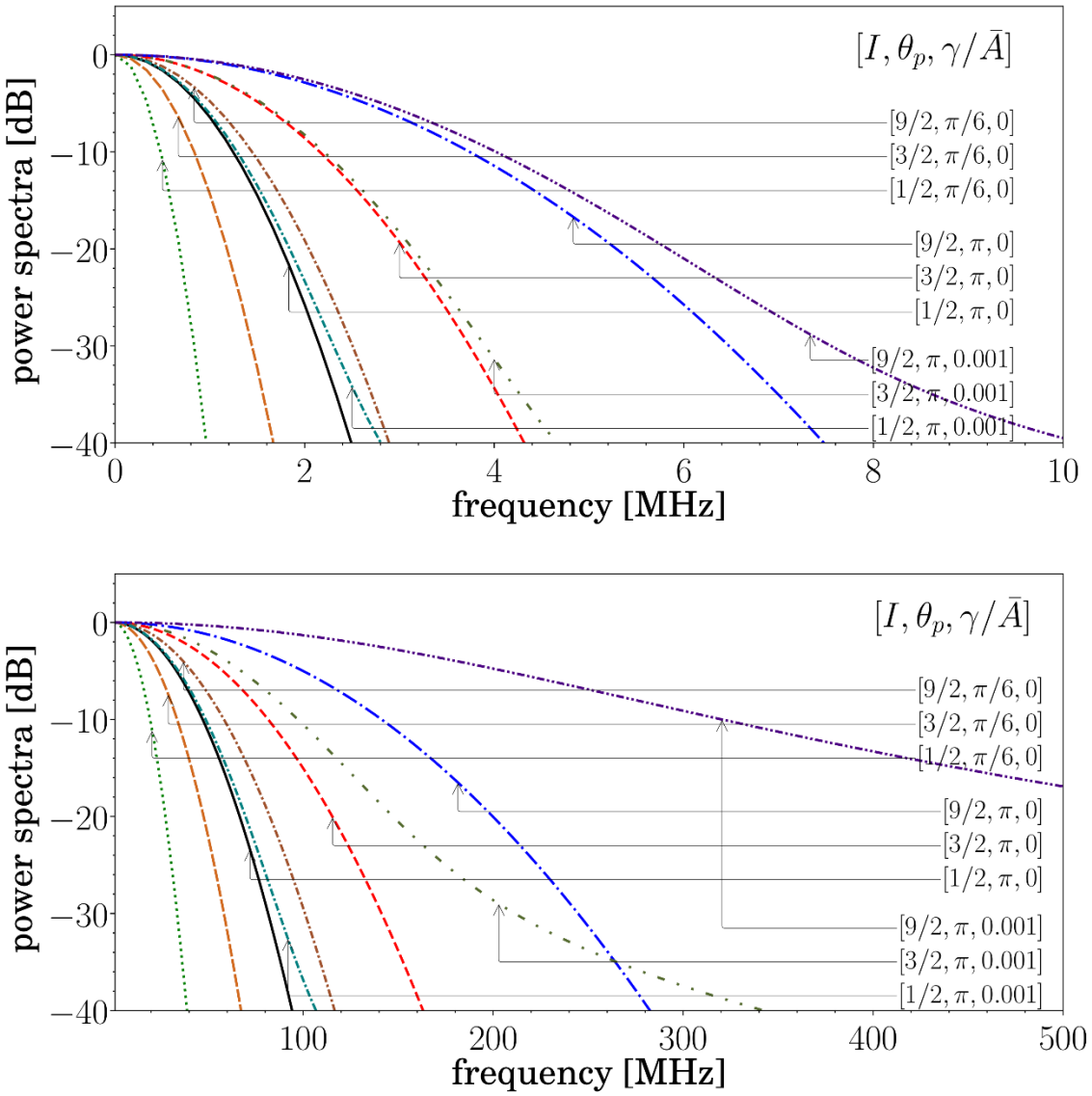
Şeklinde seçilebilir. Burada, r_i i'inci çekin spininin orijine olan uzaklığı, etkili spin sayının sayesinde bulunabileceği l_0 elektronun çökelme yarıçapıdır. Böyle bir sistem için etkili çekin spin sayısı aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$N_{eff} = \eta\frac{4\pi l_0^3}{3v_0}$$

Burada N_{eff} etkili çekin spin sayısı, η sıfırdan farklı spin kuantum sayısına sahip olan çekin spin yüzdesi, v_0 birim hücrenin hacmini ifade etmektedir. Yukarıdaki eşitlikten de görülebileceği üzere verilmiş olunan bir elektron çökelme yarıçapı için etkili çekin spin sayısı bulunabilmektedir. Tipik bir kusur merkezi için, $l_0 = 5$ nm etkili çekin spin sayısı $N_{eff} = 100$ alındığında en altyapı etkileşim sabitlerinin toplamının $\sum A_i \approx 0.1\mu$ eV olduğu görülür. Büyük spin hamamları için ise disk şeklindeki bir kuantum nokta için, KN'nin büyüme eksenindeki (3 nm) elektron dalga fonksiyosun düzgün, yarıçapsal eksende ise Gaussiyen alınırsa (12.5 nm) etkili hamam spinlerinin sayısının $N_{eff} = 10000$ olduğu görülür. Bu durumda en altyapı etkileşim sabitlerinin toplamının $\sum A_i \approx 70.856\mu$ eV olarak hesaplamak mümkündür.

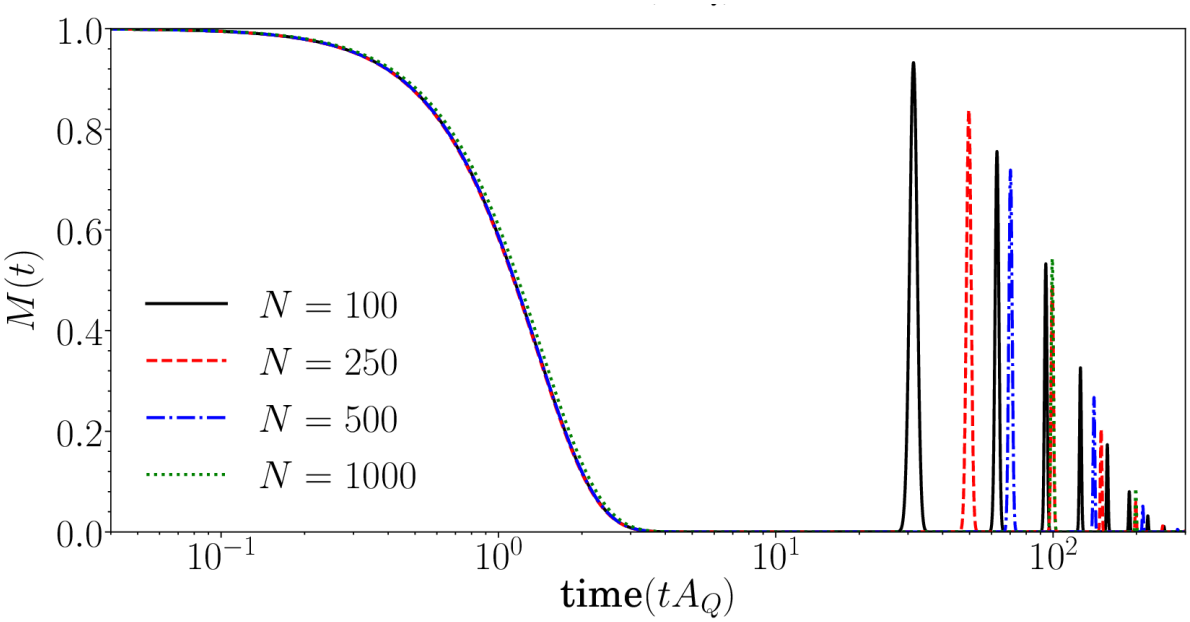
LY'sının güç görüngesi her iki sistem içinde farklı durumlar için Şekil 27'de gösterilmiştir. İlk olarak başlangıç polarizasyonu arttıkça çekin spin hamamı görüngesinin daraldığı açık bir şekilde görülebilir. Faz dönmeli eşevresizlik oranı en alt yapı etkileşimine göre çok küçük olsada ($\gamma = 0.001\bar{A}$) görüngeyi genişletmeyi Lorentziyel bir bileşen ile genişletmeyi başarmaktadır. Bunlara ek olarak Şekil 25'de de belirtildiği üzere güç görüngesindeki $\sqrt{I}$ gerçekçi çekin spin hamamlarında da vuku bulmaktadır. Bu ortak özelliklerin dışında, Kuantum noktaları, kusur merkezlerine göre 100 kat daha geniş bir bant aralığına sahiptir. Bu durumun

en önemli sebebi efektif spin sayıları(N_{eff})'dır. Kusur merkezlerin deki bant aralığı bir kaç megahertz iken kuantum noktalarda bu genişlik 100 MHz mertebelerindedir.



Şekil 27. Farklı spin-I, kutuplanma dönme oranı durumları için LY'nin gerçekçi durumlarda görünge analizi. (üst) SiP kusur merkezi. (alt) GaAs kuantum noktası.

Şekil 28'de normalizasyon şartı $A_Q = \frac{1}{N}\sum A_i^2$ olarak alınmıştır. Görüldüğü üzere ilk fazsızlaşma anı farklı büyüklükteki spin hamamları için neredeyse aynı eğri üzerinde hareket etmektedir. Ayrıca tek bir Gaussiyen zarf fonksiyonu altında ifade etmek mümkündür.



Şekil 28. Farklı büyüklükteki spin hamamları için LY'nin farklı bir normalizasyondaki hali.

5. SONUÇ

InGaAs KN'larındaki çekin spinlerine odaklanan bu hesaplamalı projedeki çalışmalarımız iki ana eksende oluşturulmuştur. Bunlardan ilki, Sheffield Üniversitesi'nden Dr. Checkhovich ve grubu tarafından ters izge yöntemiyle elde edilmiş güncel deneysel verileri, çeşitli model KN yapıları için hesapladığımız izgelerle karşılaştırarak deneysel örneklerin sahip oldukları nanoyapıların çıkarılmasıdır. Projenin diğer ekseni ise KN çekin spin hamamları üzerinde kuantum denetim sağlayabilmek adına geliştirdiğimiz özgün hesaplama yöntemleriyle aydınlattığımız devinim süreçlerinden oluşmaktadır. Başlıca sonuçlarımız aşağıda özetlenmiştir.

Nano-NMR izgesinden atomik yapı çıkarımı çalışmalarımız, iki farklı grup tarafından (Sheffield ve Toshiba) GaAs ortam içine gömülü olarak büyütülmüş InGaAs alaşımlı KN'larının uzaydaki atomik dağılımlarını deneysel NMR izgesi ile karşılaştırmalı olarak tatminkar bir şekilde ortaya çıkarmıştır. Bu süreçte 200 mertebesinde KN model yapısının moleküler statik olarak gevşetilmesi ve denge durumlarının gerinme alan dağılımlarına dayalı olarak izgelerinin hesaplaması yapılmıştır. Projenin tamamı boyunca süren bu yoğun çalışmaların yüksek etkili bir yayına dönüşmesi için, 1970'lerde ölçülmüş (Sundfors, 1974) elektrik alan gradyanı tensör parametrelerinin (S_{11} ve S_{44}) Sheffield Üniversitesi'nde daha güvenilir olarak güncellenmesi beklenmektedir.

Temel kuantum denetim araştırması çalışmalarımız ise proje bursiyerimiz Ekrem T. Güldeste tarafından 3 yıl boyunca başarıyla gerçekleştirilmiştir. İlk olarak spin hamamlarının yarıklasik devinimi ile başlanılmıştır. Gerekli deneyim kazanıldıktan sonra kuantum mekaniksel devinimi çalışabilmek için Yang ve Liu (2008) tarafından öne sürülmüş Topak ilinti açılımı (TİA) yöntemi, bursiyerimizin spin-1/2'den spin-I genelleştirmesi sonrasında Python yazılıma dönüştürülerek büyük spin hamamlarına uygulanmıştır. Proje bitişini takip eden 6 aylık sürede bu yöndeki birikimlerimizi, aşağıda önerilerde belirttiğimiz dörtkutup etkileşimli hamamlara taşıyarak yayına dönüştürmeyi hedefliyoruz.

Projenin önemli bulgularından birisi, gerinmeli KN'larındaki çekin spinleri üzerinde etkili olan dörtkutup etkileşimini kullanarak Schrödinger spin kedisi durumlarının elde edilebileceğinin hesaplamalarımızla gösterilmesidir. Bunun için uygun an ve süreli bir dizi radyo frekans darbesiyle yapılacak Bloch küresinde döndürme işlemleri ve gerçekçi performansları ayrıntılı

olarak çalışılmıştır. Bu elde edilen özel durumların kuantum hata düzeltme gibi uygulamaları söz konusudur. Projenin ilgili sonuçları geniş bir makale olarak Physical Review A dergisinde yayımlanmıştır (Bulutay, 2017).

Projenin son yılında enaltyapı etkileşimi altındaki eşevresizlik süreçleri, Loschmit yankısını ölçüt olarak kullanarak, çeşitli model çekin spin hamamları ve iki farklı katıhal sisteminde ayrıntılı olarak incelenmiştir. Bulgularımıza göre, kusur merkezi gibi küçük spin hamamlarındaki Loschmidt yankısına ait görünge 10 MHz ile sınırlı kalırken, GaAs KN gibi büyük spin sistemlerinde bu 100-400 MHz düzeyine erişmektedir. Dolayısıyla bu ikincisi gibi sistemlerde enaltyapı kaynaklı eşevresizliğin önlenmesi için sadece radyo frekans darbelerine dayalı yöntemler yeterli olamayacaktır. Araştırmamız, ayrıca bu görüngenin ne tür fiziksel niceliklere ve ne şekilde bağımlı olduğunu da ortaya çıkarmıştır. Bu çalışma Nisan 2018 tarihinde Physical Review B dergisine gönderilmiş ve halen hakem incelemesindedir (Güldeste ve Bulutay, 2018).

Öneriler

En son olarak projedeki bulgularımızın ışığında, olası takip edecek çalışmalara yol gösterici bazı önerilerde bulunmak istiyoruz.

- Çekin spin çalışmalarında, tek bir KN'sının gerçek uzay atomik dağılımının tahribatsız olarak ters izge yöntemiyle elde edilir olduğunun gösterilmesi, bu projenin önemli bir bulgusudur. Bu yöntemin, başka malzemelerde de kullanılabileceğini düşünmekteyiz. Örneğin, oldukça güncel olan iki boyutlu ve/veya az tabakalı sistemlerde safsızlık katkısıyla oluşturulacak gerinme alanlarının çekin spin yönelimleri üzerine etkilerine bakılmasının zamanlı bir çalışma olacağı inancındayız.
- Enaltyapı çiftleniminin beraberinde dörtkutup etkileşimli hamamların Loschmidth yankısının incelenmesi gerinmeli KN için yararlı bir çalışma olacaktır.
- Kuantum denetim amaçlı olarak NMR camiasında son zamanlarda geliştirilmiş CPMG, UDD gibi darbe dizi protokollerinin yukardaki etkileşimler üzerindeki performansının hesaplamalı olarak incelenmesi akla gelen diğer bir seçenektir.

Kaynaklar

Al-Hassanieh, K. A., Dobrovitski, V. V., Dagotto, E., Harmon B. N. 2006. “Numerical modeling of the central spin problem using the spin-coherent state *P*-representation”, Phys. Rev. Lett., 97, 037204.

Balian, S. J., Wolfowicz, G., Morton, J. J. L., Monteiro T. S. 2014. “Quantum-bath-driven decoherence of mixed spin systems”, Phys. Rev. B 89, 045403.

Bulutay, C. 2012. “Quadrupolar spectra of nuclear spins in strained $In_xGa_{1-x}As$ quantum dots”, Phys. Rev. B, 85, 115313.

Bulutay, C., Chekhovich, E. A., Tartakovskii A. I. 2014. “Nuclear magnetic resonance inverse spectra of InGaAs quantum dots: Atomistic level structural information”, Phys. Rev. B, 90, 205425.

Bulutay, C. 2017. “Cat-state generation and stabilization for a nuclear spin through electric quadrupole interaction”, Phys. Rev. A, 96, 012312.

Chekhovich, E. A., Kavokin K. V., Puebla, J., Krysa, A. B., Hopkinson, M., Andreev, A. D., Sanchez, A. M., Beanland, R., Skolnick, M. S., Tartakovskii A. I. 2012. “Structural analysis of strained quantum dots using nuclear magnetic resonance”, Nature Nanotech. 7, 650.

Chekhovich, E. A., Hopkinson, M., Skolnick, M. S., Tartakovskii A. I. 2015. “Suppression of nuclear spin bath fluctuations in self-assembled quantum dots induced by inhomogeneous strain”, Nature Communications, 6, 6348.

Coish, W. A., Loss, D., Yuzbashyan, E. A., Altshuler B. L. 2007. “Quantum versus classical hyperfine-induced dynamics in a quantum dot”, J. Appl. Phys. 101, 081715.

Cucchietti, F. M., Fernandez-Vidal, S., Paz J. P. 2007. “Universal decoherence induced by an environmental quantum phase transition”, Phys. Rev. A, 75, 032337.

Dalibard, J., Castin Y., Mølmer K. 1992. “Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics”, Phys. Rev.Lett. 68, 580.

Dobrovitski, V. V., Raedt H. A. 2003. “Efficient scheme for numerical simulations of the spin-bath decoherence”, Phys. Rev. E 67, 056702.

Gaudin, M. 1976. “Diagonalization of a class of spin hamiltonians”, J. Physique 37, 1087.

Gaudin, M. 2014. The Bethe Wavefunction. New York: Cambridge University Press.

Gobert, D., Kollath C. Schollwöck U., Schültz G. 2005. “Real-time dynamics in spin-1 2 chains with adaptive time-dependent density matrix renormalization group”, Phys. Rev. E 71, 036102.

Golovach, V. N., Khaetskii, A., Loss D. 2004. “Phonon-induced decay of the electron spin in quantum dots”, Phys. Rev. Lett. 93, 016601.

Güldeste, E. T., Bulutay C. 2018. “Hyperfine-driven Loschmidt echo in nanoscale spin baths”, arXiv:1804.07219v1.

Güntert, P. 2003. “Automated NMR protein structure calculation”, Prog. NMR Spectrosc. 43, 105.

Herzog, B., Hahn E.L. 1956. “Transient nuclear induction and double nuclear resonance in solids”, Phys. Rev. 103, 148.

Kane, B. E. 1998. “A silicon-based nuclear spin quantum computer”, Nature, 393, 133.

Khaetskii, A. V., Loss, D., Glazman L. 2002. “Electron spin decoherence in quantum dots due to interaction with nuclei”, Phys. Rev. Lett. 88, 186802.

Levitt, C. H. 2007. Spin Dynamics, Basics of Nuclear Magnetic Resonance. New York: Wiley.

Loss, D., DiVincenzo D. P. 1998. “Quantum computation with quantum dots”, Phys. Rev. B 57, 120.

Makhonin, M. N., Kavokin, K. V., Senellart, P., Lemaitre, A., Ramsey, A. J., Skolnick, M. S., Tartakovskii A. I. 2011. “Fast control of nuclear spin polarization in an optically pumped single quantum dot”, Nature Materials 10, 844.

Merkulov, I. A., Efros, A. L., Rosen, M. 2002. “Electron spin relaxation by nuclei in semiconductor quantum dots”, Phys. Rev. B, 65, 205309.

Mlinar, V., Bozkurt, M., Ulloa, J. M., Ediger, M., Bester, G., Badolato, A., Koneraad, P. M., Warburton, R. J., Zunger A. 2009. “Structure of quantum dots as seen by excitonic spectroscopy versus structural characterization: Using theory to close the loop”, Phys. Rev. B 80, 165425.

Nielsen, M. A., Chuang I. L. 2000. Quantum Computation and Quantum Information. New York: Cambridge University Press.

Petroff, P. M., 2003. "Epitaxial Growth and Electronic Structure of Self-Assembled Quantum Dots", Topics in Applied Physics, 90, 1.

Schuetz, M. J. A., Kessler, E. M., Vandersypen, L. M. K., Cirac, I. J., Giedke G. 2013. “Steady-state entanglement in the nuclear spin dynamics of a double quantum dot”, Phys. Rev. Lett. 111, 246802.

Schollwöck, U. 2005. “The density-matrix renormalization group”, Rev. Mod. Phys. 77, 259.

Sinitsyn, N. A., Li, Y., Crooker, S. A., Saxena, A., Smith, D.L., 2012. “Role of Nuclear Quadrupole Coupling on Decoherence and Relaxation of Central Spins in Quantum Dots”, Phys. Rev. Lett., 109, 166605.

Sklyanin, E. K. 1989. “Separation of variables in the Gaudin model”, J. Sov. Math. 47, 2473.

Syljuåsen, O. F., Sandvick A. W. 2002. “Quantum Monte Carlo with directed loops”, Phys. Rev. E 66, 046701.

Sundfors, R. K. 1974. “Experimental gradient-elastic tensors and chemical bonding in III-V semiconductors”, Phys. Rev. B, 10, 4244.

Tal-Ezer, H., Kosloff R. 1984. “An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent Schrödinger equation”, J. Chem Phys. 81, 3967.
Vandersypen, L. M. K., Chuang I. L. 2004. “NMR techniques for quantum control and computation”, Rev. Mod. Phys. 76, 1037.
Vogt, N., Jeske, J., Cole J. H. 2013. “Stochastic Bloch-Redfield theory: Quantum jumps in a solid-state environment”, Phys. Rev. B 88, 174514.
White, S., Feguin A. 2004. “Real-time evolution using the density matrix renormalization group”, Phys. Rev. Lett., 93, 076401.
Witzel, W. M., Das Sarma S. 2006. “Quantum theory for electron spin decoherence induced by nuclear spin dynamics in semiconductor quantum computer architectures: Spectral diffusion of localized electron spins in the nuclear solid-state environment”, Phys. Rev. B 74, 035322.
Witzel, W. M. Carroll, M. S., Cywinski, L., Das Sarma S. 2012. “Quantum decoherence of the central spin in a sparse system of dipolar coupled spins”, Phys. Rev. B 86, 035452.
Yang, W., Liu R.B. 2008. “Quantum many-body theory of qubit decoherence in a finite-size spin bath”, Phys. Rev. B, 78, 085315.
Yao, W., Liu, R.-B., Sham L. J. 2006. “Theory of electron spin decoherence by interacting nuclear spins in a quantum dot”, Phys. Rev. B 74, 195301.

Ek: Proje ekibinin Physical Review B dergisinde hakem incelemesinde olan makalesi

Güldeste, E. T., Bulutay C. 2018. “Hyperfine-driven Loschmidt echo in nanoscale spin baths”, arXiv:1804.07219v1.

arXiv:1804.07219v1 [quant-ph] 19 Apr 2018

Hyperfine-driven Loschmidt echo in nanoscale nuclear spin baths

Ekrem Taha Güldeste[1] and Ceyhun Bulutay[1,*]

[1] *Department of Physics, Bilkent University, Ankara 06800, Turkey*

(Dated: April 20, 2018)

The nuclear spin bath (NSB) dynamics and quantum control have primary significance for the storage and processing of quantum information within a semiconductor environment. In the presence of a carrier spin, it is the hyperfine interaction that rules the NSB characteristics. Here, we study the overall coherence decay and rephasings in hyperfine-driven NSB through the temporal and spectral behavior of the so-called Loschmidt echo (LE). Unlike prevailing emphasis on spin-1/2, NSB with larger spin quantum numbers are equally considered. First, the dependences of LE on the size, initial polarization, coupling inhomogeneity, and phase-flip rate of NSB are separately investigated. Based on this insight, a simple phenomenological expression is offered that can account for all of these features. This is then used to interpret the computed power spectra of two realistic semiconductor systems, namely, a donor center and a quantum dot that represent small and large nanoscale NSB examples, respectively. We observe that large-spin nuclei are highly vulnerable to phase-flip dephasing giving rise to significant broadening in the spectrum, reaching 100 MHz range for typical quantum dots. On the other hand for small reservoirs, as in donor centers this width narrows down by two orders of magnitude making them readily amenable for dynamical decoupling techniques. This hyperfine-driven LE response by itself can serve for discriminating its contribution from other sources in the noise spectrum, and generally, it can be helpful for the optimal utilization and control of the nuclear spin reservoir.

I. INTRODUCTION

Nuclear spins in a solid state matrix are largely immune to charge noise which grants them coherence lifetime in excess of one second at room temperature, that is by several orders longer than that of the electron spins [1]. Impartially, this electrical isolation qualified them early on for several quantum information processing tasks [2]. Primarily, nuclear spins are thought to be ideal as quantum registers [3–5], and in various ways they can be harnessed for gate operations [6, 7]. In virtually all of these cases, for fast and convenient manipulation by electrical [8] or optical [9] means an intermediary electron associated with a charged quantum dot or a defect center is exploited. For this composite electron and nuclear spin bath (NSB) system the hyperfine (hf) interaction is the dominant process that affects the coherence of both parties [10–13].

Intimately, this topic is linked with the central spin model that makes up a large body of literature [14–17]. Till now, the emphasis in this model has been on the decoherence of the electron, but undoubtedly, it will be highly beneficial to visit the hf-driven coherence dynamics from the NSB standpoint. One source of motivation for this comes from the proposal based on maximally entangled state generation between two electron spins by sequentially allowing them to interact with a NSB mediated by hf interaction [18]. Its notable feature is that no information about the NSB, let alone a special preparation, is required for the success of this recipe. As its descendant, a quantum interface between optical fields and the polarized nuclear spins was suggested for a singly charged quantum dot, again aided by hf interaction that allows both high-fidelity read-out and write-in of quantum information between the NSB and the output field [19]. The established efficacy of dynamical decoupling techniques for suppressing the dipolar fluctuations is another point that needs to be reconsidered in the case of strong and inhomogeneous nature of the hf interaction [20].

These matters substantiate the need for a deeper understanding of the dynamics of NSB under hf interaction. For this purpose the Loschmidt echo (LE) is a suitable measure which corresponds to the return probability of spin bath to its initial state [21]. It is particularly apt for the bifurcated NSB dynamics that results from hf coupling to an electron spin that happens to be in a superposition state which is a befitting case in quantum information applications [22].

Our aim in this work is to develop a simple understanding on how the hf interaction governs the NSB temporal and spectral characteristics, specifically by revealing the dependences on bath size, coupling nonuniformity, initial state, and the nuclear spin quantum number, I. For the latter, exclusively the spin-1/2 NSB has been treated in the literature [3–7, 9, 16–19], or indirectly through the so-called pseudospin approximation [22], even though group III-V semiconductors involve quadrupolar spins with $I \geq 1$ [23]. We observe that for unthermalized nanoscale spin baths LE can reveal recoherence effects as it resembles a closed system dynamics within the duration of interest [22]. Under simple scalings we show that LE curves for different bath size or spin-I coalesce to a universal one. Based on these findings, finally we consider two realistic cases of a GaAs quantum dot that corresponds to a large NSB, and the charged defect cen-

* bulutay@fen.bilkent.edu.tr

ter in silicon representing a small reservoir, and compare their LE spectra.

The paper is organized as follows. In Sec. II we present our model Hamiltonian, a discussion of its connection to physical phenomena, and other theoretical elements that our analysis is based on. Section III contains our results, where we first establish basic dependences of the LE, and then use this in interpreting two realistic solid-state examples corresponding to small and large NSB prototypes. Conclusions are provided in Sec. IV, and the appendix section embodies some derivations of LE expressions.

II. THEORY

A. Model Hamiltonian

The two constituents of the model are the central spin-1/2 (frequently referred to as the qubit) that is represented with the spin up/down basis states ($|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$), and the homospin-I nuclei with spin quantum number I ranging between 1/2 up to 9/2 forming the bath sector. The qubit and bath spins together are treated in our model as a closed system within the time scale of relevance for the hf-dominant regime. In the absence of qubit longitudinal relaxation, the so-called pure dephasing Hamiltonian [24] is expressed as

$$\hat{H} = \hat{H}_+ \left|\uparrow\right\rangle\left\langle\uparrow\right| + \hat{H}_- \left|\downarrow\right\rangle\left\langle\downarrow\right| , \tag{1}$$

where the individual nuclear spins are conditioned on the qubit states as: $|\uparrow\rangle \to \hat{H}_+$, $|\downarrow\rangle \to \hat{H}_-$, with

$$\hat{H}_\pm = \pm \sum_i A_i \hat{I}_i^z , \tag{2}$$

where $\hat{I}_i^z$ is the projection along the central spin quantization axis of the i'th nuclear spin operator. For convenience we set $\hbar \to 1$.

To track the quantum coherence, we start the system with the qubit being in the superposition state $|\psi\rangle = C_+ |\uparrow\rangle + C_- |\downarrow\rangle$ that is in tensor product with the bath state $|B_0\rangle$ as

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\psi\rangle \otimes |B_0\rangle . \tag{3}$$

As the system evolves under the Hamiltonian in Eq. (1) this product state turns into an entangled state

$$|\Psi(t)\rangle = C_+ |\uparrow\rangle \otimes |B_+(t)\rangle + C_- |\downarrow\rangle \otimes |B_-(t)\rangle . \tag{4}$$

Therefore the initial superposition information of the qubit leaks to the bath state which is an indication of loss of qubit coherence that can be identified from the degree of distinguishability of the two pathways from the bath sector as,

$$L(t) = \langle B_-(t)|B_+(t)\rangle = \langle B_0| e^{i\hat{H}_- t} e^{-i\hat{H}_+ t} |B_0\rangle . \tag{5}$$

This is directly related to the so-called the Loschmidt echo (LE) also known as return probability to initial configuration as, $M(t) = |L(t)|^2$ [21].

B. Initial bath state

For nanoscale spin baths in contrast to mixed states, the pure states become more appropriate that can be prepared through a number of means [24]. Moreover, the dependence on the initial nuclear spin states can be reduced substantially by the dynamical decoupling techniques [20]. Therefore, we shall mainly employ various pure initial bath states. For these, we assume the individual nuclear spins to be coherent spin states [25] centered at the spherical angles $|\theta_i, \phi_i\rangle$ (see, also the Appendix Section). For unpolarized baths we start with a randomly selected angles from a uniform distribution over the Bloch sphere. In the case of baths with initial polarization the distribution is restricted to a cone defined by a polar angle θ_p.

C. Physical relevance of the model

Before proceeding further, we would like to express the particular time scale and physical context where this model becomes practically relevant. First of all, it should be mentioned that we are using the so-called Fermi-contact hf interaction which applies to conduction band electrons in bulk semiconductors; for the holes the *dipolar* hf interaction needs to be considered [26, 27]. In this work we are interested in the pure dephasing regime where no longitudinal relaxation hence qubit spin flip takes place. These so-called non-secular parts of the hf interaction excluded here as well as in other treatments like Ref. [28], become crucial in the data writing stage, but they are intentionally set to off-resonance during the storage where maintaining coherence is of a concern [29].

Furthermore due to fixed lattice spacing in a solid state environment that limits the proximity of two neighboring spins the dipole-dipole interaction typically proceeds within the millisecond or longer durations [7]. This makes it to be more than three orders of magnitude slower than that of the hf interaction and can be safely ignored within the time frame under consideration here [10, 11]. In connection to this, we should point out that we consider *a single realization* of NSB, as opposed to *ensemble averaged* calculations as in the seminal work of Ref. [10]. The latter particularly wipes out the coherent oscillations in LE by removing some of the integrals of motion which could be justified in the presence of dipole-dipole interaction [30]. As mentioned above, our work does not apply to this long time regime.

Another related term is the *indirect* hf interaction originating from the mean nuclear polarization which leads to additional nuclear spin precession [31]. It plays a role in the relaxation of the transverse electron polarization [32–34]. However, since we focus on the NSB dynamics this indirect hf interaction can be practically omitted when the electron Knight field is high enough compared to the Overhauser field [31]. Finally, the presence of an external magnetic field will result in a negligible Zeeman splitting

in comparison to hf interaction because of the very small nuclear magnetic moment [35]. Under these conditions the Hamiltonian in Eq. (1) can serve as a good model for studying the evolution of NSB coherence subject to hf interaction of the central spin [24].

D. Loschmidt echo

For a one-body Hamiltonian in Eq. (2), an analytical form of $L(t)$ for a spin-I environment can be written as,

$$L(t)=\prod_i\Big\{\sum_{m_i=-I_i}^{I_i}W_i^{m_i}e^{-i2A_im_it}\Big\}, \tag{6}$$

where,

$$W_i^{m_i}=\binom{2I_i}{I_i+m_i}\left[\cos(\theta_i/2)\right]^{2(I_i+m_i)}\left[\sin(\theta_i/2)\right]^{2(I_i-m_i)}, \tag{7}$$

is the weight function which is completely independent from azimuthal angle ϕ, I is the spin quantum number, $m\in\{-I,-I+1,\ldots,I-1,I\}$ are the possible eigenvalues along the quantization axis, θ is the polar angle and the subscript i denotes the nuclear site index. The simplest case is available for homospin-1/2 environment where Eq. (6) reduces to,

$$L(t)=\prod_i\Big\{\cos^2(\theta_i/2)e^{-iA_it}+\sin^2(\theta_i/2)e^{iA_it}\Big\}, \tag{8}$$

which has a very similar structure derived in Eq. (16) of [36]. It is straightforward to calculate power spectra (see, also the Appendix Section), $|M(f)|^2$ through the Fourier transform of LE which yields,

$$M(f)=\sum_{\substack{m_1,m_2,\ldots,m_N,\\ m_1',m_2',\ldots,m_N'}}\Big(\prod_{i=1}^{N}W_i^{m_i}W_i^{m_i'}\Big)\times\delta\left(f+\frac{1}{\pi}\sum_i^N A_i(m_i-m_i')\right). \tag{9}$$

E. Phase flip decoherence

Decoherence in quantum systems is conveniently calculated using the Lindblad Master equation [37, 38]

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat\rho(t)=-i\left[\hat H,\hat\rho(t)\right]+\sum_{m=1}^{2I}\Big[\hat L_m\hat\rho(t)\hat L_m^\dagger-\frac{1}{2}\Big\{\hat L_m^\dagger\hat L_m,\hat\rho(t)\Big\}\Big], \tag{10}$$

where $\hat\rho$ is the spin density operator, $[\,,]$ and $\{\,,\}$ represent commutator and anti-commutator, respectively, $\hat L_m$ is the so-called Lindblad operator characterizing the nuclear spin's coupling to its environment. In relation to LE within pure dephasing regime, the phase-flip of a spin-I system is the main decoherence channel, as governed by [39, 40]

$$\hat L_m=\sqrt{\frac{(2I)!}{m!(2I-m)!}\left(\frac{1-e^{-\gamma}}{2}\right)^m\left(\frac{1+e^{-\gamma}}{2}\right)^{2I-m}}\,\hat I_z^m, \tag{11}$$

where γ is the phase-flip rate. In terms of density operators $\hat\rho_\pm^i(t)$ of two bath trajectories ($\pm$), for each spin i the LE becomes,

$$M(t)=\prod_{i=1}^{N}\mathrm{Tr}\left(\hat\rho_-^i(t)\hat\rho_+^i(t)\right), \tag{12}$$

where Tr is the trace operator.

III. RESULTS

A. Study of basic dependences

Before we confront realistic cases, we would like to gain a simple understanding of LE by probing separately the dependence on key variables. For the results in this section, we prefer to use normalized time and frequency, defined with respect to the mean value of hf coupling constants, $\bar A=\sum_{i=1}^N A_i/N$, so that the normalized time becomes $\bar t=t\bar A$, and the normalized frequency is $\bar f=f/\bar A$. We should note that other normalization schemes also exist in the literature [16, 17, 41].

We begin by analyzing a typical temporal behavior of LE of a spin-1/2 reservoir composed of $N=1000$ nuclei, each initially starting as a coherent spin state $|\theta_i,\phi_i\rangle$ with the angles chosen from a uniform distribution over the full Bloch sphere. The hf coupling constants of the spins in NSB are inevitably detuned from each other even for the homonuclear case due to spatial variation of the central electron wavefunction over the lattice. We assume a uniform spread in hf coupling constants with a maximum deviation of $0.025\bar A$. Figure 1 (top) shows the initial dephasing in LE followed by diminished-amplitude rephasings, all of which of the same Gaussian profile with equal halfwidths. The lower panel of Fig. 1 displays the size dependence, N of LE; as expected, larger NSB exhibits faster dephasing, or equivalently, narrower halfwidth of revivals with reducing amplitudes. For a sufficiently large NSB (such as $N\geq 1000$ here) these echos are periodic of the form $[\cos\bar t\,]^{\alpha NI}$ with a Gaussian revival envelope.

Coherence time and the revival amplitudes highly depend on the initial bath polarization which is illustrated on the upper part of Fig. 2. Here, for each nuclear spin we choose an initial coherent spin state to be centered at the polar angle θ_i that is within a cone defined by the angle $\theta_p>\theta_i$ which approaches π for the limit of unpolarized NSB (i.e., over the full Bloch sphere). Hence, this introduces a non-vanishing initial Overhauser field that

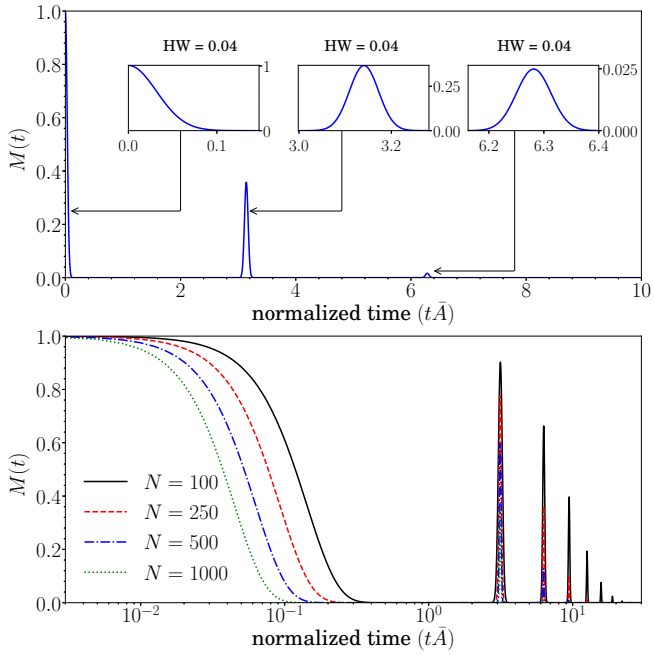


FIG. 1. (top) LE for $N = 1000$. Insets show the halfwidth (HW) of revivals. (bottom) Effect of different number of nuclear spins, N forming the bath. In all cases $I = 1/2$, $\Delta A_{max} = 0.025\bar{A}$, initial bath coherent spin states are uniformly distributed over the Bloch sphere.

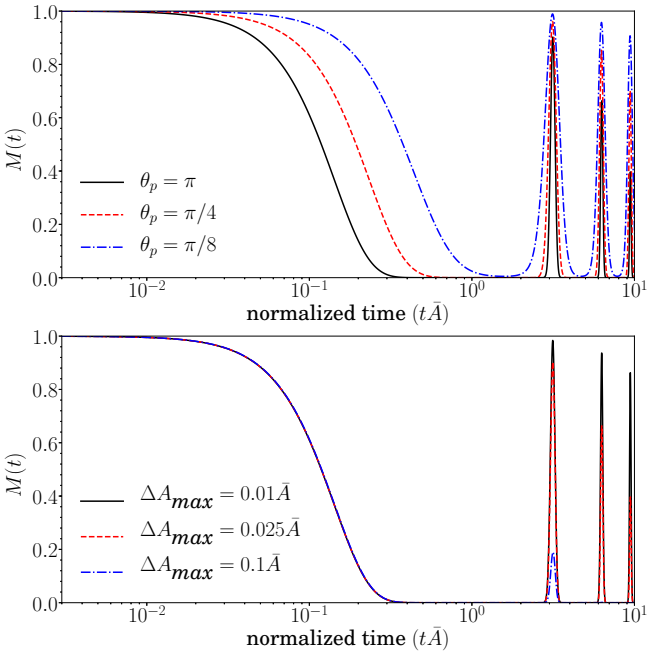


FIG. 2. (top) Effect of initial nuclear spin polarization (θ_p) on LE, $\Delta A_{max} = 0.025\bar{A}$. (bottom) Effect of spread in the hf coupling constants (ΔA_{max}) of individual nuclear spins; initial bath coherent spin states are uniformly distributed over the Bloch sphere. In all cases $N = 100$, $I = 1/2$.

persists in time within the pure dephasing model. As observed from upper Fig. 2 higher polarization of NSB results in increased echo amplitudes together with a wider halfwith. In the lower part of Fig. 2, this time we study the effect of different spread of hf coupling constants, where ΔA_{max} is the maximum deviation from the NSB mean value (*i.e.*, $\Delta A_{max} = \max\{|A_i - \bar{A}|\}$). The form $[\cos \bar{t}\,]^{\alpha N I}$ deduced from Fig. 1 implies that there should be no change in echo widths since mean value of coupling constants ($\bar{A}$) remains same, which is indeed confirmed in this figure. Moreover, a narrower hf distribution causes stronger rephasing amplitudes.

Next, we study the dependence on the nuclear spin quantum number I. As this value is increased from 1/2 up to 9/2 its eigenspectrum gets denser, and more closely resembles a classical spin when $I \gg 1$ [42, 43]. Figure 3 (top) shows that the LE width decreases with increasing I, or conversely, implying that extreme quantization as in spin-1/2 promotes enhanced rephasing. These family of curves coalesce to a single one (see, inset of Fig. 3) under the $t\bar{A}\sqrt{I}$ time scaling. Lower panel in Fig. 3 displays the corresponding power spectra of the temporal behavior. As our primary aim is to compare spectral broadenings under various cases, here and throughout this work each spectrum is vertically shifted to set its dc value to 0 dB. This also confirms the widening of LE spectrum in proportion to $\sqrt{I}$ for homospin-I NSBs.

So far, we only included the hf coupling of each individual nuclear spin with the central spin. To render the model more realistic decoherence effects needs to be included. This can be introduced without much complication by phase-flip channel which operates on the off-diagonal terms of the density matrix. In Fig. 4 the spin-1/2 and 3/2 NSBs are compared for various phase-flip rates, γ. The LE which has a Gaussian profile in the absence of decoherence is seen to develop an additional exponential character. Likewise, the power spectra (lower part of Fig. 4) for non-vanishing phase-flip rates acquire the so-called Voigt profile. Thus, by increasing γ one can sweep the LE spectrum from pure Gaussian into Voigt, and up to a Lorentzian lineshape under strong decoherence limit. This corroborates with previous reports on the deviation from gaussianity under various NSB conditions [22, 44–46].

An analytical derivation of LE for a general NSB would be highly desirable, but it has remained to be a formidable task. Cucchietti *et* al. obtained a form valid under restrictive assumptions and only for spin-1/2 baths [47]. On the other hand our controlled-parameter cases as summarized in Figs. 1-4 leads to a widely applicable phenomenological expression given by

$$M(\bar{t}) \sim \exp\left[-NI\left(\alpha_p \sin^2(\bar{t}) + \beta_p \sigma^2 \bar{t}^{\,2}\right) - \Gamma \bar{t}\right], \quad (13)$$

where σ^2 is the variance of the hf coupling constants, and α_p, β_p, Γ are NSB polarization-dependent fitting parameters where the latter possesses other dependences. It

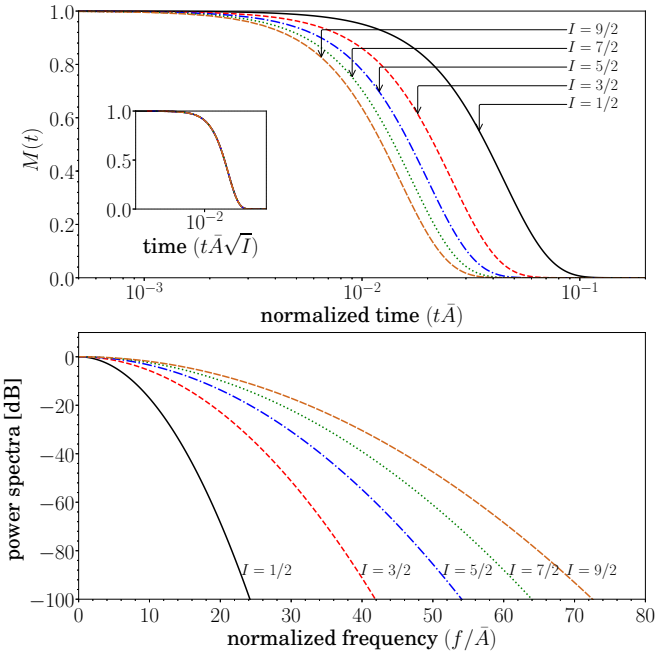


FIG. 3. Comparison of different spin-I values. (top) Temporal behavior; inset illustrates the coalescence of the family of curves under the indicated normalization. (bottom) spectral behavior. In all cases $N = 1000$, $\Delta A_{max} = 0.025\bar{A}$, and the initial bath spins are uniformly distributed over the Bloch sphere.

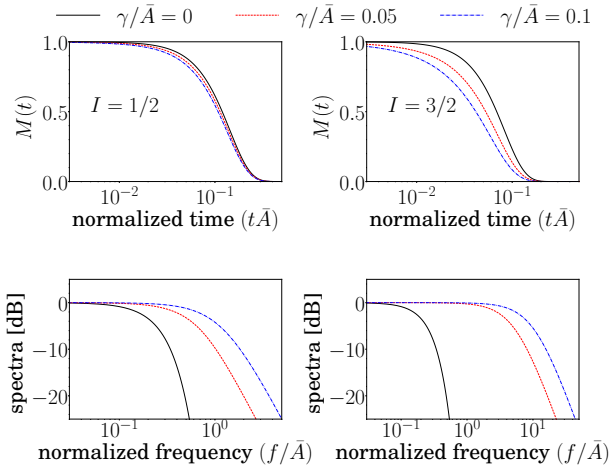


FIG. 4. Effect of phase flip decoherence, (left) spin-1/2, (right) spin-3/2. $N = 100$, $\Delta A_{max} = 0.3\bar{A}$. Initial bath spins are uniformly distributed over the Bloch sphere.

faithfully captures all of the size, spin-I, hf coupling inhomogeneity and decoherence dependences of both echo periodicity and amplitudes for $N \gtrsim 1000$ NSBs. In the absence of decoherence, i.e., $\gamma, \Gamma \to 0$, it reduces to Gaussian form.

B. Realistic solid-state models

In the light of these basic facts we are ready to compute and interpret LE of realistic NSBs, for which we choose a donor center in silicon, and a GaAs quantum dot, to represent small and large reservoir cases, respectively. For the spatial distribution of hf coupling constants the electron envelope wave function is taken to be of the form [41],

$$\Psi(r_i) = \Psi(0) \exp\left(-\frac{r_i^2}{2l_0^2}\right), \tag{14}$$

where r_i is the distance of the i'th lattice site from the origin, and l_0 is the electron confinement radius through which an effective number of spins N_{eff} can be defined as [11],

$$N_{\mathit{eff}} = \eta \frac{4\pi l_0^3}{3v_0}, \tag{15}$$

in terms of the abundance of spin-nonzero nuclei, η, and the volume occupied by a single atom, v_0, constrained by normalization condition $v_0 \sum_i |\Psi(r_i)|^2 \approx 1$. For a typical defect center with a radius of 5 nm, the number of effective spins is $N_{\mathit{eff}} = 100$, and the sum of coupling constants becomes, $\sum_{i=1}^{N_{\mathit{eff}}} A_i \approx 0.1$ μeV for the value of $\Gamma \approx 0.05$ of nonzero nuclear spins as in silicon [44]. In the case of a large NSB, we choose a disk-shaped quantum dot where the electron envelope wave function is taken to be Gaussian (uniform) in the radial (growth) direction, with radius (height) 12.5 nm (3 nm). The effective number of spins becomes $N_{\mathit{eff}} = 10\,000$, and the sum of couplings is estimated as $\sum_{i=1}^{N_{\mathit{eff}}} A_i \approx 70.856$ μeV.

The LE power spectra for both systems are compared in Fig. 5 under various cases which authenticates the individual parameter traits discussed in the previous section. First of all, a finite initial polarization of NSB significantly narrows the spectrum compared to unpolarized one. Introducing a phase-flip decoherence as small as $\gamma = 0.001\bar{A}$ substantially broadens the spectrum by contributing an increasing Lorentzian component to the original Gaussian profile. Moreover, as observed in Fig. 3, there occurs $\sqrt{I}$ enlargement of the spectra for spin-I NSBs. Apart from these common features, the quantum dot system has about two orders of magnitude wider frequency bandwidth compared to donor center case with the latter being limited to a few megahertz. This directly follows from their N_{eff} ratio, as demonstrated in the lower part of Fig. 1. Hence, for the case of spin-9/2 quantum dot (as with indium nuclei) the power spectrum can extend to some 100 MHz.

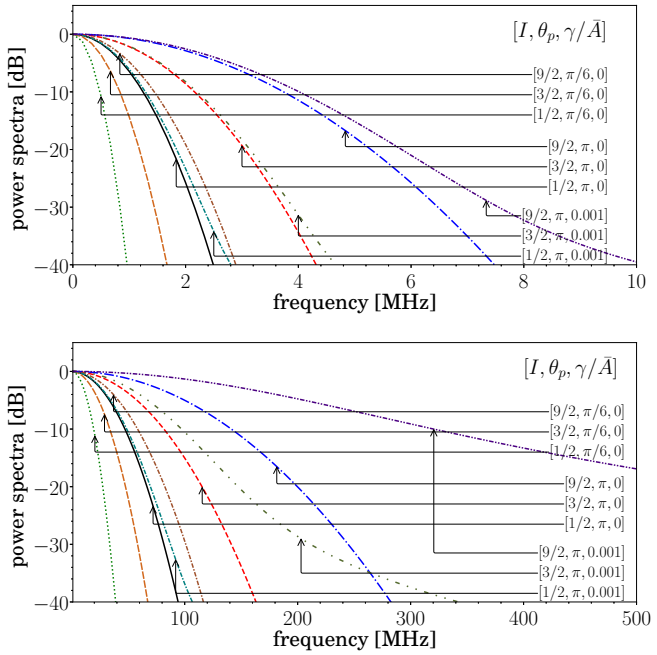


FIG. 5. Power spectra of LE for realistic systems under different spin-I, polarization and flip-rate cases. (top) P donor in Si matrix. (bottom) GaAs quantum dot.

IV. CONCLUSIONS

Hyperfine interaction is commonly the dominant process that governs the quantum evolution of the NSB in solid state systems [11]. The analysis of the hf-induced quantum fluctuations can be worthwhile for various practical settings, such as prolonging the qubit coherence in the storage phase of quantum registers [33, 48], or for obtaining indistinguishable photons from quantum dots having a resident electron [49]. This work offers a simple theoretical exposition via the temporal and spectral characterization of the LE in nanoscale NSBs. We extract basic dependences on various reservoir parameters like size, initial polarization, coupling inhomogeneity, spin quantum number, decoherence, and develop a phenomenological LE expression. We hope that it may also initiate further theoretical studies for a rigorous derivation.

Large-spin nuclei ($I \gg 1/2$) are found to be highly vulnerable to phase-flip dephasing, such that values as low as parts per thousand of hf rates can give rise to significant broadening in the spectrum, reaching 100 MHz range for the case of typical quantum dots. This decoherence component is discernible from the exponential tail, as opposed to Gaussian profile of the decoherence-free NSB spectrum.

One follow-up of this work for $I \geq 1$ nuclei can be to include the quadrupolar interaction which approaches a few megahertz rates in the case of highly strained quantum dots [23, 50]. When the nuclear spin noise needs to be contrasted with experimental data at even lower frequencies [51], then efficient many body techniques particularly devised for handling large number of spins, like cluster-correlation expansion can be invoked [48, 52].

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by TÜBİTAK, The Scientific and Technological Research Council of Turkey through the project No. 114F409.

APPENDIX: SOME EXPRESSIONS ON LE

A coherent spin state $|\Omega = (\theta, \phi)\rangle$ can be expressed as,

$$|\Omega\rangle = \sum_{m=-I}^{m=I} \binom{2I}{I+m}^{1/2} [\cos(\theta/2)]^{I+m} \times [\sin(\theta/2)]^{I-m} e^{-i(I-m)\phi} |m\rangle . \quad (16)$$

Initially at $t = 0$, the overall bath state can be expressed as the tensor product of spin coherent states, meaning for this one-body Hamiltonian we can compute $L(t)$ as the product of individual spin evolutions. Then, Eq. (5) becomes,

$$L(t) = \prod_{i=1}^{N} \langle \Omega_i(0)| e^{-i2A_i \hat{I}_i^z t} |\Omega_i(0)\rangle , \quad (17)$$

from which we can directly arrive,

$$L(t) = \prod_i \Big\{ \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} e^{-i2A_i m_i t} \Big\}, \quad (18)$$

after carrying out inner products. We can rewrite Eq. (18) as,

$$L(t) = \prod_i L_i(t), \quad (19)$$

where,

$$L_i(t) = \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} e^{-i2A_i m_i t}. \quad (20)$$

The Fourier transform of $L(t)$ becomes the convolution of all $L_i(f)$ in frequency domain in the form,

$$L(f) = L_1(f) * L_2(f) * \cdots * L_N(f). \quad (21)$$

Then, calculating $L_i(f)$ yields,

$$\begin{aligned} L_i(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi f} \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} e^{-i2A_i m_i t} dt , \\ &= \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi f} e^{-i2A_i m_i t} dt , \\ &= \sum_{m_i=-I_i}^{I_i} W_i^{m_i} \delta(f + A_i m_i/\pi). \end{aligned} \quad (22)$$

Inserting this expression into Eq. (21) leads to,

$$L(f) = \sum_{m_1,m_2,\ldots,m_N} \Big(\prod_{i=1}^{N} W_i^{m_i}\Big)\delta(f + \frac{1}{\pi}\sum_{i}^{N} A_i m_i). \quad (23)$$

Similarly for its complex conjugate we have,

$$[L(f)]^* = \sum_{m_1',m_2',\ldots,m_N'} \Big(\prod_{j=1}^{N} W_j^{m_j'}\Big)\delta(f - \frac{1}{\pi}\sum_{j}^{N} A_j m_j). \quad (24)$$

Hence, the Fourier transform of LE, $M(f) = L(f) * [L(f)]^*$ is given by the expression,

$$M(f) = \sum_{\substack{m_1,m_2,\ldots,m_N,\\ m_1',m_2',\ldots,m_N'}} \Big(\prod_{i=1}^{N} W_i^{m_i} W_i^{m_i'}\Big) \times\delta\left[f + \frac{1}{\pi}\sum_{i}^{N} A_i(m_i - m_i')\right]. \quad (25)$$

[1] P. C. Maurer, G. Kucsko, C. Latta, L. Jiang, N. Y. Yao, S. D. Bennett, F. Pastawski, D. Hunger, N. Chisholm, M. Markham, D. J. Twitchen, J. I. Cirac, and M. D. Lukin, "Room-temperature quantum bit memory exceeding one second," Science **336**, 1283–1286 (2012).

[2] B. E. Kane, "A silicon-based nuclear spin quantum computer," Nature (London) **393**, 133–137 (1998).

[3] J. M. Taylor, C. M. Marcus, and M. D. Lukin, "Long-lived memory for mesoscopic quantum bits," Phys. Rev. Lett. **90**, 206803 (2003).

[4] J. M. Taylor, A. İmamoğlu, and M. D. Lukin, "Controlling a mesoscopic spin environment by quantum bit manipulation," Phys. Rev. Lett. **91**, 246802 (2003).

[5] W. M. Witzel and S. Das Sarma, "Nuclear spins as quantum memory in semiconductor nanostructures," Phys. Rev. B **76**, 045218 (2007).

[6] J.M. Taylor, G. Giedke, H. Christ, B. Paredes, J.I. Cirac, P. Zoller, M.D. Lukin, and A. İmamoğlu, "Quantum information processing using localized ensembles of nuclear spins," arXiv preprint cond-mat/0407640 (2004).

[7] J. Casanova, Z.-Y. Wang, and M. B. Plenio, "Arbitrary nuclear-spin gates in diamond mediated by a nitrogen-vacancy-center electron spin," Phys. Rev. A **96**, 032314 (2017).

[8] D. Loss and D. P. DiVincenzo, "Quantum computation with quantum dots," Phys. Rev. A **57**, 120–126 (1998).

[9] A. İmamoğlu, D. D. Awschalom, G. Burkard, D. P. DiVincenzo, D. Loss, M. Sherwin, and A. Small, "Quantum information processing using quantum dot spins and cavity qed," Phys. Rev. Lett. **83**, 4204–4207 (1999).

[10] I. A. Merkulov, Al. L. Efros, and M. Rosen, "Electron spin relaxation by nuclei in semiconductor quantum dots," Phys. Rev. B **65**, 205309 (2002).

[11] J. Schliemann, A. Khaetskii, and D. Loss, "Electron spin dynamics in quantum dots and related nanostructures due to hyperfine interaction with nuclei," Journal of Physics: Condensed Matter **15**, R1809 (2003).

[12] W. Zhang, V. V. Dobrovitski, K. A. Al-Hassanieh, E. Dagotto, and B. N. Harmon, "Hyperfine interaction induced decoherence of electron spins in quantum dots," Phys. Rev. B **74**, 205313 (2006).

[13] C. Latta, A. Srivastava, and A. İmamoğlu, "Hyperfine interaction-dominated dynamics of nuclear spins in self-assembled ingaas quantum dots," Phys. Rev. Lett. **107**, 167401 (2011).

[14] M. Gaudin, "Diagonalisation d'une classe d'hamiltoniens de spin," Journal de Physique **37**, 1087–1098 (1976).

[15] E. Barnes, L. Cywiński, and S. Das Sarma, "Nonperturbative master equation solution of central spin dephasing dynamics," Phys. Rev. Lett. **109**, 140403 (2012).

[16] D. Stanek, C. Raas, and G. S. Uhrig, "Dynamics and decoherence in the central spin model in the low-field limit," Phys. Rev. B **88**, 155305 (2013).

[17] D. Stanek, C. Raas, and G. S. Uhrig, "From quantum-mechanical to classical dynamics in the central-spin model," Phys. Rev. B **90**, 064301 (2014).

[18] H. Christ, J. I. Cirac, and G. Giedke, "Entanglement generation via a completely mixed nuclear spin bath," Phys. Rev. B **78**, 125314 (2008).

[19] H. Schwager, J. I. Cirac, and G. Giedke, "Interfacing nuclear spins in quantum dots to a cavity or traveling-wave fields," New Journal of Physics **12**, 043026 (2010).

[20] D. Suter and G. A. Álvarez, "*Colloquium* : Protecting quantum information against environmental noise," Rev. Mod. Phys. **88**, 041001 (2016).

[21] R. A. Jalabert and H. M. Pastawski, "Environment-independent decoherence rate in classically chaotic systems," Phys. Rev. Lett. **86**, 2490–2493 (2001).

[22] W. Yao, R.-B. Liu, and L. J. Sham, "Restoring coherence lost to a slow interacting mesoscopic spin bath," Phys. Rev. Lett. **98**, 077602 (2007).

[23] C. Bulutay, "Quadrupolar spectra of nuclear spins in strained ingaas quantum dots," Phys. Rev. B **85**, 115313 (2012).

[24] G. Giedke, J. M. Taylor, D. D'Alessandro, M. D. Lukin, and A. İmamoğlu, "Quantum measurement of a mesoscopic spin ensemble," Phys. Rev. A **74**, 032316 (2006).

[25] J. Ma, X. Wang, C. P. Sun, and F. Nori, "Quantum spin squeezing," Phys. Rep. **509**, 89 – 165 (2011).

[26] A. M. Stoneham, *Theory of Defects on Solids* (Oxford Classic Texts in the Physical Sciences, Oxford, 1975).

[27] W. A. Coish and J. Baugh, "Nuclear spins in nanostructures," physica status solidi (b) **246**, 2203–2215 (2009).

[28] L. Cywiński, W. M. Witzel, and S. Das Sarma, "Electron spin dephasing due to hyperfine interactions with a nuclear spin bath," Phys. Rev. Lett. **102**, 057601 (2009).

[29] C. Deng and X. Hu, "Decoherence of nuclear spin quantum memory in a quantum dot," IEEE Transactions on Nanotechnology **4**, 35–39 (2005).

[30] S. I. Erlingsson and Y. V. Nazarov, "Evolution of localized electron spin in a nuclear spin environment," Phys. Rev. B **70**, 205327 (2004).

[31] I. A. Merkulov, G. Alvarez, D. R. Yakovlev, and T. C. Schulthess, "Long-term dynamics of the electron-nuclear spin system of a semiconductor quantum dot," Phys. Rev. B **81**, 115107 (2010).

[32] W. Yao, R.-B. Liu, and L. J. Sham, "Theory of electron spin decoherence by interacting nuclear spins in a quantum dot," Phys. Rev. B **74**, 195301 (2006).

[33] C. Deng and X. Hu, "Analytical solution of electron spin decoherence through hyperfine interaction in a quantum dot," Phys. Rev. B **73**, 241303 (2006).

[34] W. M. Witzel and S. Das Sarma, "Quantum theory for electron spin decoherence induced by nuclear spin dynamics in semiconductor quantum computer architectures: Spectral diffusion of localized electron spins in the nuclear solid-state environment," Phys. Rev. B **74**, 035322 (2006).

[35] M. H. Levitt, *Spin dynamics: basics of nuclear magnetic resonance* (John Wiley & Sons, 2007).

[36] F. M. Cucchietti, J. P. Paz, and W. H. Zurek, "Decoherence from spin environments," Phys. Rev. A **72**, 052113 (2005).

[37] J. R. Johansson, P. D. Nation, and F. Nori, "Qutip: An open-source python framework for the dynamics of open quantum systems," Comput. Phys. Commun. **183**, 1760–1772 (2012).

[38] J. R. Johansson, P. D. Nation, and F. Nori, "Qutip2:a python framework for the dynamics of open quantum systems," Comput. Phys. Commun. **184**, 1234–1240 (2013).

[39] S. Pirandola, S. Mancini, S. L. Braunstein, and D. Vitali, "Minimal qudit code for a qubit in the phase-damping channel," Phys. Rev. A **77**, 032309 (2008).

[40] C. Bulutay, "Cat-state generation and stabilization for a nuclear spin through electric quadrupole interaction," Phys. Rev. A **96**, 012312 (2017).

[41] J. Hackmann and F. B. Anders, "Spin noise in the anisotropic central spin model," Phys. Rev. B **89**, 045317 (2014).

[42] M. Yu. Petrov and S.V. Yakovlev, "Comparison of quantum-mechanical and semiclassical approaches for an analysis of spin dynamics in quantum dots," Journal of Experimental and Theoretical Physics **115**, 326–336 (2012).

[43] T. Opatrný, "Squeezing with classical hamiltonians," Phys. Rev. A **92**, 033801 (2015).

[44] W. A. Coish and D. Loss, "Hyperfine interaction in a quantum dot: Non-markovian electron spin dynamics," Phys. Rev. B **70**, 195340 (2004).

[45] C. Cormick and J. P. Paz, "Decoherence induced by a dynamic spin environment: The universal regime," Phys. Rev. A **77**, 022317 (2008).

[46] W. A. Coish, J. Fischer, and D. Loss, "Free-induction decay and envelope modulations in a narrowed nuclear spin bath," Phys. Rev. B **81**, 165315 (2010).

[47] F. Cucchietti, S. Fernandez-Vidal, and J. P. Paz, "Universal decoherence induced by an environmental quantum phase transition," Phys. Rev. A **75**, 032337 (2007).

[48] W. Yang, W.-L. Ma, and R.-B. Liu, "Quantum many-body theory for electron spin decoherence in nanoscale nuclear spin baths," Reports on Progress in Physics **80**, 016001 (2017).

[49] R. N. E. Malein, T. S. Santana, J. M. Zajac, A. C. Dada, E. M. Gauger, P. M. Petroff, J. Y. Lim, J. D. Song, and B. D. Gerardot, "Screening nuclear field fluctuations in quantum dots for indistinguishable photon generation," Phys. Rev. Lett. **116**, 257401 (2016).

[50] C. Bulutay, E. A. Chekhovich, and A. I. Tartakovskii, "Nuclear magnetic resonance inverse spectra of ingaas quantum dots: Atomistic level structural information," Phys. Rev. B **90**, 205425 (2014).

[51] M. J. Stanley, C. Matthiesen, J. Hansom, C. Le Gall, C. H. H. Schulte, E. Clarke, and M. Atatüre, "Dynamics of a mesoscopic nuclear spin ensemble interacting with an optically driven electron spin," Phys. Rev. B **90**, 195305 (2014).

[52] W. Yang and R.-B. Liu, "Quantum many-body theory of qubit decoherence in a finite-size spin bath," Phys. Rev. B **78**, 085315 (2008).

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Doç. Dr. CEYHUN BULUTAY
Proje No:	114F409
Proje Başlığı:	Hesaplamalı Nano-Nmr İle Kuantum Noktalarında Atomik Çözünürlükte Yapı Analizi Ve Kuantum Denetim
Proje Türü:	1001 - Araştırma
Proje Süresi:	36
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	İHSAN DOĞRAMACI BİLKENT Ü. FEN F. FİZİK B.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	15/04/2015 - 15/04/2018
Onaylanan Bütçe:	181948.0
Harcanan Bütçe:	148096.47
Öz:	Nükleer manyetik rezonans (NMR), yarım asırı aşkın süredir yapı analizi için yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir. Proje başlığındaki ?nano-NMR? deyimi, makroskopik ölçekli örnekler yerine, nano boyutlu yapılar üzerinde işlevsel olacak özgün bir NMR türevine karşılık gelmektedir. Bu kuramsal çalışmada, InGaAs kuantum noktalarında (KN?larında) optik algılamalı NMR yöntemi çerçevesinde atomik düzeyde yapı analizi ve çekin spin hamamı devinimine dair iki farklı yönde araştırmalar gerçekleştirilmiştir. Birincisi, tahribatsız bir analitik gereç olarak özellikle malzeme bilimine katkı yapacak potansiyeldedir, ikinci yön ise nano-NMR ile kuantum denetim araştırmalarının geleceği açısından değerlidir. Nano-NMR izgesinden atomik yapı çıkarımı çalışmalarımız, GaAs ortam içine gömülü olarak büyütülmüş InGaAs alaşımlı KN?larının uzaydaki atomik dağılımlarını deneysel NMR izgesi ile karşılaştırmalı olarak ortaya çıkarmıştır. Temel kuantum denetim araştırması çalışmalarımızda ise küçük spin hamamlarından, onbin mertebesinde çekirdek içeren spin hamamlarına kadar yarıklasik ve özgün topak ilinti açılım yöntemini kullanarak tamamen kuantum mekaniksel devinimleri hesaplanmıştır. Bilhassa enaltyapı etkileşimi altındaki eşevresizlik süreçleri, küçük ve büyük ebatlı model spin hamamlarının yanında, gerçekçi katıhal sistemlerinde de ayrıntılı olarak incelenmiştir. Son olarak, gerinmeli KN?larındaki çekin spinleri üzerinde etkili olan dörtkutup etkileşimini kullanarak uygun zamanda ve açıda uygulanacak bir dizi radyo frekans darbesiyle yapılacak Bloch küresinde döndürme işlemleri sonucunda Schrödinger spin kedisi durumlarının elde edilebileceği hesaplamalarımızla gösterilmiştir. Bu durumların kuantum hata düzeltme gibi uygulamaları söz konusudur. Genel anlamda ise projede elde edilen bulgular, malzeme bilimi ve yeni gelişen kuantum teknolojileri açısından değere sahiptir.
Anahtar Kelimeler:	Katıhal NMR, yarıiletkenlerde kuantum denetim, enaltyapı etkileşimi, topak ilinti açılımı
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır
Projeden Yapılan Yayınlar:	1- Spin cat state generation for quadrupolar nuclei in semiconductor quantum dots or defect centers (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 2- Spectral Analysis of Loschmidt Echo in Nuclear Spin Baths (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 3- Spin cat state generation for quadrupolar nuclei in semiconductor quantum dots or defect centers (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 4- Spin Hamam Deviniminin Zamana Bağlı Klasik Ortalama Alanda Çözümü (Bildiri - Ulusal Bildiri - Poster Sunum), 5- Büyük spin hamamlarında Loschmidt yankısının görünge analizi (Bildiri - Ulusal Bildiri - Poster Sunum), 6- Spin Hamam Deviniminin Zamana Bağlı Klasik Ortalama Alanda Çözümü (Bildiri - Ulusal Bildiri - Poster Sunum), 7- Hesaplamalı Nano-NMR (Bildiri - Ulusal Konferans - Davetli Konuşmacı), 8- Hesaplamalı Nano-NMR (Bildiri - Ulusal Konferans - Davetli Konuşmacı),

TÜBİTAK