

Spin-dinamika nanomechanikai rendszerekben

projekt záró beszámoló
NFKI-azonosító: 100373, típus: PD
vezető kutató: Pályi András

1. Tudományos eredmények bemutatása

Az elmúlt évek látványos fejlődést hoztak az egyedi szénnanocsöveken alapuló kvantum eszközök előállításának területén. A fejlődés számos áttörő jelentőségű kísérletet tett lehetővé, melyek egyértelműsítették a nanoszerkezetek különleges elektromos, mágneses és mechanikai tulajdonságait, és betekintést adtak egyszerű kölcsönható kvantumrendszerek - pl. egy egyetlen elektronból és egyetlen mechanikai rezgési módusból álló hibrid rendszer - viselkedésébe. Az alábbiakban összefoglaljuk ezen elméleti projekt fő hozzájárulásait ehhez a területhez. Eredményeink közvetlenül kapcsolódnak olyan, jelenleg is folyó kísérleti munkákhoz, amik nanomechanikai kvantumrendszerek és spin-alapú információhordozók dinamikájának fundamentális megértését és vezérlését célozzák.

1.1. Koherens spin-fonon kölcsönhatás mechanikai rezonátorban

Kidolgoztuk a spin-fonon csatolást elméletileg leíró Hamilton-operátort szén nanocső mechanikai rezonátorban a különböző rezgési módusokra [Pályi]. Kísérletileg releváns paraméterekből megbecsültük, hogy a spin-fonon kölcsönhatás energiaskálája a hajlítási módusra a legjelentősebb. A kölcsönhatást leíró Hamilton-operátor alakja a spin és a hajlítási módus kölcsönhatása esetén megegyezik az üregrezonátoros kvantumelektrodinamika (cQED) alapmodelljével (Jaynes-Cummings modell): a spin játssza a cQED-beli kétállapotú atom szerepét, míg a hajlítási módus az elektromágneses tér diszkrét módusával analóg a modellünkben. Kísérletileg releváns paraméterekből megbecsültük, hogy a nanocső rezonátorokban a csatolt spin-fonon rendszer a Jaynes-Cummings modell "erős csatolású" paramétertartományában van, azaz a két részrendszer közötti energiáttranszfer időskálája jóval rövidebb, mint az részrendszerek energiavesztését és dekoherenciáját jellemző időskálák. Ez az eredmény előrevetíti számos cQED-ből ismert jelenség megjelenését az általunk javasolt kölcsönható spin-fonon rendszerben.

Kidolgoztuk és modelleztünk egy, a spin-fonon-kölcsönhatás detektálására szolgáló kísérleti elrendezést. Eredményeink szerint a spin-fonon kölcsönhatás egy markáns következménye, hogy a hajlítási módus a kölcsönhatás eredményeképpen nemlineárisává válik, és emiatt várhatóan a nemlineáris oszcillátorok tipikus mechanikai tulajdonságait (bistabilitás, hiszterézis, stb) mutatja majd a kísérletekben, így téve detektálhatóvá a spin-fonon

kölcsönhatást. Az általunk vizsgált rendszerben a nemlinearitás gyenge mechanikai gerjesztés esetén jelentkezik, ellentétben a szokványos mechanikai nemlinearitással amely erős gerjesztésnél fontos.

A vonatkozó eredményeinket a Physical Review Letters folyóiratban publikáltuk [Palyi]. Itt közölt eredményeinkről beszámolt az amerikai fizikai társulat (APS) Physics című online folyóirata és a Phys.org tudományos hírportál is. Közleményünkre eddig 30 független hivatkozás érkezett. Edward Laird (Oxford University, UK) kísérleti csoportjának egyik aktuális projektje az általunk leírt koherens spin-fonon-kölcsönhatás és annak mechanikai következményeinek detektálása.

1.2. Mechanikai deformáció hatása a Pauli-blokád transzporteffektusra

Megvizsgáltuk, hogy a kettős kvantumdotokban tapasztalható ún. Pauli-blokád transzporteffektus mikor használható szén nanocsőbeli elektronspin-alapú kvantumbitek inicializálására és kiolvasására, illetve az általunk korábban megjósolt kvantumos spin-fonon-kölcsönhatás detektálására [Szechenyi2013]. Kiszámoltuk egy megfelelően hangolt nanocső kettős kvantumdoton átfolyó stacionárius áram függését a rendszer paramétereitől (külső mágneses tér, spin-pálya-kölcsönhatás erőssége, szennyezők konfigurációja, stb.), és azonosítottuk a paramétertartomány azon szegmensét, ahol a Pauli-blokád fennáll, és így a kvantumbit-kiolvasás és a spin-fonon-kölcsönhatás detektálása egyaránt megvalósítható.

Leo Kouwenhoven (TU Delft, Hollandia) csoportja nanocső-alapú mechanikai rezonátorban kísérletileg vizsgálta az ún. Pauli-blokád transzporteffektust [Pei]. Kapcsolódó elméleti munkánkban [Szechenyi2015] modellt alkottunk az elektronspin és a nanocső mechanikai (hajlítási) szabadsági fokának kölcsönhatására. Publikációnk legjelentősebb eredménye, hogy a modellparaméterek megfelelő megválasztásával sikerült finom részletekig reprodukálni a kísérleti csoport bizonyos eredményeit.

1.3. Spin-qubit vezérlés elektromos térrel: mechanikai deformáció és atomi szennyezők hatása

A Kouwenhoven csoport soronkövetkező kísérletében [Laird] olyan méréseket végeztek, ahol egy görbült tengelyű szén nanocsőben izolált elektron spinjét váltóáramú elektromos térrel kontrollálják. Egy korábbi, tőlünk független elméleti munka eredményei szerint a görbület által okozott mechanikai deformáció biztosít kölcsönhatást az elektronspin és az elektromos tér között. Mi egy alternatív mechanizmust javasoltunk és dolgoztunk ki [Szechenyi2014], amiben a spin-pálya-kölcsönhatás és atomi szennyezők együttes jelenléte indukál effektív csatolást az elektromos tér és az elektronspin között. Kiszámoltuk, hogy az elektron spinállapotának megváltoztatásához szükséges időskála, az ún. Rabi-idő, hogyan függ a rendszer paramétereitől, különös tekintettel a gerjesztő váltóáramú elektromos tér amplitúdójára. A vizsgált

mechanizmus meglepő, de kísérletileg könnyen kimutatható jellemzői, hogy erős gerjesztés esetén (i) a Rabi-idő nem-monoton módon függ a gerjesztő elektromos tér amplitúdójától, és (ii) hogy a többfotonos spinkontroll Rabi-ideje egy nagyságrendbe eshet az egyfotonos folyamatot jellemző Rabi-idővel. A többfotonos spinkontrollra vonatkozó vizsgálatainkat kiterjesztettük arra az esetre is [Romhanyi], amikor az ún. Rashba-féle spin-pálya-kölcsönhatás teremt kapcsolatot a gerjesztő elektromos tér és a gerjesztett elektron spinje között; ez a Rashba-féle mechanizmus nem csak szén nanocsövek, de kvázi-egydimenziós félvezető nanopálcák esetén is relevanciával bír. A projekt időtartama során kísérletileg is demonstrálták a többfotonos spin-átmeneteket, mind nanocsőben [Pei], mind félvezető nanopálcákban [Stehlik].

1.4. Információvesztési mechanizmusok szén nanostruktúrákban

A szén nanocsövekre jellemző hiperfinom kölcsönhatás (C-13 magok spinje és a nanocső elektronjainak mágneses kölcsönhatása) kapcsán a közelmúltban ellentmondásos kísérleti eredmények jelentek meg az irodalomban. Ezek motiválták, hogy szénnanocső-kvantumdotokra kidolgozzuk a pálya-hiperfinom kölcsönhatás (PHF) elméletét. Fő eredményeink [Csiszar]. hogy (i) a PHF erőssége összemérhető a Fermi-kontakt és dipól-dipól hiperfinom mechanizmusok erősségével, (ii) a PHF révén a magspinnek kölcsönhatnak az elektronok kétállapotú "völgy" szabadsági fokával, (iii) a kvantumdotban csapdázott elektronok kvantumállapotai mikroszekundumos időskálán dekoherálnak a PHF hatására. Nanocsöveken kívül az eredmények kvalitatívan érvényesek más anyagokra is, pl. grafén heteroszerkezetekre és egyrétegű átmenetifém-kalkogenidekre (pl. MoS₂).

Együttműködést kezdtünk a Budapest Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem kísérleti nanoelektronika csoportjával. Közös munkánkban [Scherubl] javasoltunk és elemeztünk egy olyan kísérleti elrendezést, ami kvantumdotok segítségével lehetőséget ad egy szupravezető kontaktusból kiáramló Cooper-párok spinállapotának vizsgálatára. Rámutattunk, hogy az elektron-spinekre ható különböző információvesztési mechanizmusok, mint például a hiperfinom kölcsönhatás, jelentősen leronthatják egy ilyen elrendezés hatékonyságát; ennél fogva erre a célre érdemes a kvantumdotokat magspin-szegény anyagokban, pl. szén nanocsövekben, létrehozni.

Bizonyos kétdimenziós anyagokban, például grafénben vagy félvezető átmenetifém-kalcikogenidekben, az elektronok spinjük mellett egy *völgy szabadsági fok*kal vagy *völgy-index*szel is rendelkeznek: például grafénben a vezetési sáv valamely alacsonyenergiás elektronjának hullámszámvektora vagy K , vagy K' közelében van, ennek megfelelően egy elektron völgy-indexe két különböző értéket vehet fel, azaz egy bit információt kódolhat. Az elmúlt években jelentős tudományos erőfeszítés irányul annak megértésére, hogy milyen fizikai mechanizmusok segíthetik vagy akadályozhatják a völgy-index információhordozóként való felhasználását [Xu]. Ez motiválta elméleti munkánkat [Boross], amiben azt vizsgáltuk, hogy egy reális grafén mintában fellépő szórási folyamatok milyen módon és milyen időskálán vezetnek a völgy-

indexben kódolt információ elvesztéséhez. Fő eredményeink, hogy (i) egy analitikusan kezelhető modellt alkottunk a szórási folyamatra, figyelembe véve az elektronokat szóró szennyezők által keltett potenciál dielektromos árnyékolását (ii) a modell keretében kifejeztük az információvesztési időskála paraméterfüggését (paraméterek: elektronsűrűség, szennyezők konfigurációja).

1.5. Publikációs tevékenység összefoglalása

A projekt futamideje alatt a projekthez kapcsolódóan 8 folyóiratcikk született, 1 Physical Review Letters és 7 Physical Review B. Ezekre az MTMT adatbázisban jelenleg szereplő adatok szerint eddig összesen 42 független hivatkozás érkezett (mtmt).

2. Hivatkozások

[Boross] P. Boross and A. Palyi, Valley relaxation in graphene due to charged impurities, [Phys. Rev. B 92, 035420 \(2015\)](#)

[Csiszar] G. Csiszar and A. Palyi, Orbital hyperfine interaction and qubit dephasing in carbon nanotube quantum dots, [Phys. Rev. B 90, 245413 \(2014\)](#)

[Laird] E. A. Laird, F. Pei, and L. P. Kouwenhoven, A valley–spin qubit in a carbon nanotube, *Nat. Nanotech.* 8 565 (2013)

[Palyi] A. Palyi, P. R. Struck, M. Rudner, K. Flensberg and G. Burkard, Spin-orbit induced strong coupling of a single spin to a nanomechanical resonator, [Phys. Rev. Lett. 108, 206811 \(2012\)](#)

[Pei] F. Pei, E. A. Laird, G. Steele and L. P. Kouwenhoven, Valley–spin blockade and spin resonance in carbon nanotubes, *Nat. Nanotech.* 8, 565 (2012).

[Romhanyi] J. Romhanyi, G. Burkard and A. Palyi, Subharmonic transitions and Bloch-Siegert shift in electrically driven spin resonance, [Phys. Rev. B 92, 054422 \(2015\)](#)

[Scherubl] Z. Scherubl, A. Palyi, and Sz. Csonka, Probing individual split Cooper pairs using the spin qubit toolkit, [Phys. Rev. B 89, 205439 \(2014\)](#)

[Stehlik] J. Stehlik et al., Extreme Harmonic Generation in Electrically Driven Spin Resonance, *Phys. Rev. Lett.* 112, 227601 (2014)

[Szechenyi2013] G. Szechenyi and A. Palyi, Current hot spot in the spin-valley blockade in carbon nanotubes, [Phys. Rev. B 88, 235414 \(2013\)](#)

[Szechenyi2014] G. Szechenyi and A. Palyi, Maximal Rabi frequency of an electrically driven spin in a disordered magnetic field, [Phys. Rev. B 89, 115409 \(2014\)](#)

[Szechenyi2015] G. Szechenyi and A. Palyi, Shape-sensitive Pauli blockade in a bent carbon nanotube, [Phys. Rev. B 91, 045431 \(2015\)](#)

[Xu] X. Xu, W. Yao, D. Xiao, and T. F. Heinz, Spins and pseudospins in layered transition metal dicalcogenides, [Nat. Phys. 10, 343 \(2014\)](#)

3. Költségtervtől történő eltérések és indoklásuk

Az eredeti költségtervtől való legjelentősebb eltérés, hogy az eredetileg hároméves projekt futamideje végülis négy év lett. A hosszabbítást 2014 augusztusában kérvényeztem az OTKÁ-nál, a következő indoklással: „Az információtechnológiai eszközök beszerzése az elmúlt években az ELTÉ-n rendkívüli nehézségekbe ütközött, emiatt a pályázatban vállalt feladatok egy részének végrehajtása is késést szenved. Az idei évben történt adminisztratív változásoknak köszönhetően várhatóan sikerül befejezni a beszerzéseket, így a jövő évben módunk lesz a fennmaradó feladatok elvégzésére, a vonatkozó eredmények publikálására, és konferenciákon való bemutatására.” A futamidő-hosszabbítás kapcsán 2014 szeptemberben kérvényeztem forrás-átcsoportosítást, az indoklás lényege az alábbi volt: „A hátralevő időszakban kerül sor az eredetileg tervezett beruházási kiadások kifizetésére; ... A hátralevő időszakban hangsúlyt kap az eddigi eredmények ismertetése nemzetközi fórumokon,...”.

További két alkalommal kérvényeztem forrás-átcsoportosítást. (1) Egy 2014-es utazásom kapcsán (tanulmányút a Harvard University-re, Mikhail Lukin csoportjába, és részvétel az APS March Meeting konferencián Denverben), melynek költségei meghaladták az eredetileg 2014-re tervezett utazási keretet.

(2) Egy 2016 januári utazásom kapcsán (tanulmányút, University of New South Wales, Sydney, Ausztrália). Ennek költségeit nagyjából (~600 eFt) a meghívó fél fedezte, az én oldalamról a jelen projekt keretéből 300 eFt-ra volt szükség. A kérvényt az alábbiakkal indokoltam: „Az utazás céljai: (a) Az OTKA PD pályázatomban elért tudományos eredmények bemutatása egy ún. “Gordon Godfrey Public Lecture” keretében, és további informális diszkussziók keretében. (b) A vendéglátóval (Prof. Dimitrie Culcer) közös, 2011 óta tartó, az OTKA PD pályázatomban kapcsolódó tudományos együttműködés hatékonyságának további növelése: ha a kiutazás megvalósul, akkor várhatóan annak időszakában véglegesítenénk az együttműködésből származó első közös tudományos kéziratot. (c) A University of New South Wales egyetemen működő kísérleti kvantuminformátika kutatócsoport az elmúlt években csoport jelentős áttöréseket ért el az OTKA PD pályázatomban tudományterületén (elektronspin-alapú kvantuminformációfeldolgozás; Morello et al., [Nature 467, 687 \(2010\)](#), Pla et al., [Nature 489, 541 \(2012\)](#), Pla et al., [Nature 489, 541 \(2013\)](#)). A kiutazás

módot adna a kutatócsoporttal való kapcsolatteremtésre, és lehetőséget nyújtana egy kutatási együttműködés elkezdésére.”

4. A projekt eredményeinek ismertetése szakmai fórumokon:

4.1. Meghívott előadások nemzetközi konferenciákon

4.1.1. Coherent valley dynamics in carbon nanotubes

Energy-Materials-Nanotechnology West Meeting, Valleytronics Workshop, Houston, TX, USA, 2013. 01. 7-10.

4.1.2. Nonlinear effects in electrically driven spin resonance

Quantum Computing with Electron Spin Qubits program, Kavli Institute of Theoretical Physics, Peking, Kína, 2014.07.21.

4.1.3. Nonlinearities in electrically driven spin resonance

2nd School and Conference on Spin-based Quantum Information Processing, Konstanz, Németország, 2014.08.21.

4.2. Meghívott előadások hazai konferenciákon, iskolákon

4.2.1. Spin-dinamika nanomechanikai rezonátorokban

MTA Szilárdtestfizikai Bizottság tudományos ülése, 2012. 05. 10.

4.2.2. Kvantumbitek szilárdtestekben

Mafihe Kvantumfizika Téli Iskola, 2014.02.03-05.

4.3. Előadások nemzetközi konferenciákon

4.3.1. Spin-orbit-mediated strong coupling of a single spin to a nanomechanical resonator

DPG Frühjahrstagung, Berlin, Németország, 2012.03.25-03.30.

4.3.2. Maximal Rabi frequency of an electrically driven spin in a disordered magnetic field

APS March Meeting, Denver, Colorado, USA, 2014.03.03-07.

4.3.3. Orbital hyperfine interaction and qubit dephasing in carbon nanotube quantum dots

APS March Meeting, San Antonio, Texas, USA, 2015.03.02-06.

4.4. Külföldi szemináriumi előadások

4.4.1. Spin-orbit-induced strong coupling of a single spin to a nanomechanical resonator

Universität Regensburg, Németország, 2012. 06. 15.

4.4.2. Nonlinear effects in electrically driven spin resonance

Mesoscopic Physics Seminar, Universität Würzburg, Németország, 2015. 01. 27.

4.4.3. Nonlinear effects in electrically driven spin resonance

Gordon Godfrey Seminar, School of Physics, University of New South Wales, Sydney, Ausztrália, 2016. 01. 14.

4.4.4. Interplay of spin, valley and mechanics in carbon nanotube quantum dots

Department of Materials, Oxford University, UK, 2016. 01. 26.

4.5. Hazai szemináriumi előadások

4.5.1. Elektronspin és rácsrezgések erős csatolása mechanikai rezonátorban
Wigner FK Kvantumoptika és Kvantuminformatika csoport, 2012. 01. 03.

4.5.2. Elektronállapotok koherens kontrollja szén nanocsövekben

Wigner FK SzFI, 2012. 04. 03.

4.5.3 Elektronspin és rácsrezgések erős csatolása mechanikai rezonátorban

BME Egzotikus Kvantumfázisok csoport, 2012. 04. 11.

4.5.4. Two simple models of electrically driven spin resonance

BME Elméleti Fizika Tanszék, 2013. 12. 13.

4.5.5. Electrically driven spin resonance in quantum dots

Wigner FK SzFI Kvantumoptika és Kvantuminformatika csoport, 2014.04.01.

4.5.6. Pauli-blokád szén nanocsövekben

Elméleti Fizika Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, 2015.03.12.

4.5.7. Valley qubit in a silicon quantum dot

BME Elméleti Fizika Tanszék, 2015. 12. 11.

5. Díjak, elismerések a projekt időtartama alatt

5.1. Bolyai-ösztöndíj, 2012-2015

5.2 Gombás Pál-díj, Eötvös Loránd Fizikai Társulat, 2015