ARTEQ : Quantum Hardware - Cours 6 - Centres NV dans le diamant
Jean-Damien Pillet - jean-damien.pillet@polytechnique.edu

Un atome artificiel niché dans le diamant

Le diamant est un matériau carboné dans lequel existent de nombreux défauts cristallins. L'un de ces défauts est le centre "Nitrogen-Vacancy" (appelé par la suite "centre NV") qui associe un atome d'azote avec un site non occupé adjacent à l'atome d'azote. Ces exercices ont pour but d'illustrer 3 applications de ce système quantique.

Exercice 1 : Un capteur quantique

Dans l'état de charge négatif, le centre NV possède deux électrons qui forment un spin $S = 1$. On pourrait penser *a priori* que le fondamental est dégénéré, ce n'est pas le cas. Nous allons ici déterminer sa structure énergétique interne et en déduire la réponse à l'application d'un stimulus extérieur, comme une contrainte mécanique, un champ électrique ou un champ magnétique.

1.1. Le système est décrit par l'observable vectorielle $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_X, \hat{S}_Y, \hat{S}_Z)$ correspondant à un spin 1. Dans la base $|m_S = +1\rangle, |m_S = 0\rangle, |m_S = -1\rangle$ des états propres de $\hat{S}_Z$, ses composantes s'écrivent

$$\hat{S}_X = \hbar\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_Y = \hbar\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_Z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Calculer les matrices associées aux opérateurs $\hat{S}_X^2$, $\hat{S}_Y^2$ et $\hat{S}_Z^2$ dans cette même base, puis montrer que $\hat{S}^2 = 2\hbar^2\hat{I}$, où $\hat{I}$ est l'opérateur unité en dimension 3. Justifier ce dernier résultat.

1.2. Les spins des 2 électrons non-appariés du centre NV interagissent via une interaction magnétique dipôle-dipôle ce qui a pour conséquence de stabiliser une configuration anti-alignée. L'Hamiltonien s'écrit ainsi

$$\hat{H}_0 = D_X\frac{\hat{S}_X^2}{\hbar} + D_Y\frac{\hat{S}_Y^2}{\hbar} + D_Z\frac{\hat{S}_Z^2}{\hbar}\,. \tag{2}$$

Montrer que, à un changement d'origine des énergies près que l'on précisera, l'Hamiltonien $\hat{H}_0$ peut s'écrire sous la forme suivante

$$\hat{H}_0 = D\frac{\hat{S}_Z^2}{\hbar} + E\left(\frac{\hat{S}_X^2}{\hbar} - \frac{\hat{S}_Y^2}{\hbar}\right). \tag{3}$$

1.3. Trouver les états propres et énergies propres associées de $\hat{H}_0$.

1.4. En utilisant un argument de symétrie lié à la structure du centre NV, justifier que le paramètre E est a priori nul.

1.5. E devient non nul en présence d'une déformation locale causée par une contrainte mécanique ou par un champ électrique appliqué perpendiculairement à l'axe du centre NV. Tracer l'évolution des énergies des états propres en fonction du paramètre E.

1.6. Prenons $E = 0$ pour la suite de l'exercice. Les états propres de $\hat{H}_0$ sont alors l'état $|m_S = 0\rangle$, dont l'énergie est nulle, et les états $|m_S = \pm 1\rangle$ d'énergie $\hbar D$. Quel est l'effet d'un champ magnétique $\vec{B}$

$$\vec{B} = B_{\parallel}\vec{e}_Z + B_{\perp}\vec{e}_X\,, \tag{4}$$

sur les énergies des états $|m_S = 0, \pm 1\rangle$? On rappelle la forme de cette interaction magnétique (effet Zeeman)

$$W_Z = g_{\mathrm{NV}}\mu_B\vec{B}\cdot\frac{\hat{\vec{S}}}{\hbar} \tag{5}$$

où g_{NV} est le facteur gyromagnétique du centre NV et μ_B le magnéton de Bohr. On regardera indépendamment l'effet des contributions selon z et x.

1.7. Il est possible expérimentalement de détecter la transition $m_S = 0 \to m_S = \pm 1$, correspondant à une raie de résonance magnétique à la fréquence de 2,87 GHz. Donner une représentation graphique de l'effet du champ magnétique sur cette résonance.

1.8. Le facteur gyromagnétique du centre NV est $g \approx 2$ et $\mu_B = 9,27 \times 10^{-24}\,\mathrm{J}\cdot\mathrm{T}^{-1}$. Montrer que grâce à cette variation de la fréquence de la résonance magnétique, le centre NV peut être utilisé pour mesurer l'amplitude du champ magnétique, avec une réponse que l'on exprimera en $\mathrm{MHz}\cdot\mathrm{mT}^{-1}$.

Exercice 2 : Une mémoire quantique

Nous avons vu dans les cours précédents que les circuits supraconducteurs permettaient de réaliser des qubits que l'on pouvait écrire et lire efficacement mais avec un temps de cohérence fortement limité par l'interaction avec l'environnement. Cela limite le temps de stockage de l'information. Il est possible de contourner ce problème en les combinant à d'autres systèmes quantiques mieux protégés contre la décohérence comme le centre NV dont les temps de cohérence peuvent atteindre la ms (pour le T_2). Dans cet exercice, nous allons voir comment coupler des centres NV à une cavité pouvant jouer le rôle de bus quantique.

2.1. On suppose qu'un petit champ magnétique est appliqué, les centres NV sont ainsi réduit à des systèmes à 2 niveaux dont le fondamental est $|m_S = 0\rangle$ et le premier état excité $|m_S = 1\rangle$. En s'inspirant du couplage d'un qubit à une cavité, proposer un Hamiltonien décrivant le couplage entre la cavité et le spin. On pourra introduire les opérateurs $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ et σ_z et une constante de couplage g.

2.2. Le couplage entre un spin d'un centre NV et le champ magnétique généré par le courant dans le résonateur est en réalité donné par $\hat{H}_{int} = -\gamma_e \hat{\vec{S}}.\hat{\vec{B}}$. En déduire un ordre de grandeur pour g. Quel problème voyez-vous ?

2.3. Afin d'augmenter le couplage avec le résonateur, on peut utiliser un grand nombre de spins. Ecrire le nouvel Hamiltonien décrivant cette situation.

2.4. En l'absence de couplage, quel serait l'état fondamental $|G\rangle$ de l'ensemble des spins. Combien de fois le premier état excité serait-il dégénéré ?

2.5. Considérons une situation où la cavité contient 1 photon et les spins sont dans leur état fondamental à l'instant $t = 0$, on peut noter cet état $|1, G\rangle$. Vers quel état excité le système peut-il évoluer ? Avec quel constante de couplage ? Qu'observe-t-on ?

2.6. Combien y a-t-il de "dark states" non couplés à la cavité ? A votre avis, pourquoi peuvent-ils être utiles ?