

Gruppe

MATERIALMODELLIERUNG

Dr. Daniel Urban | Telefon +49 761 5142-378 | daniel.urban@iwm.fraunhofer.de

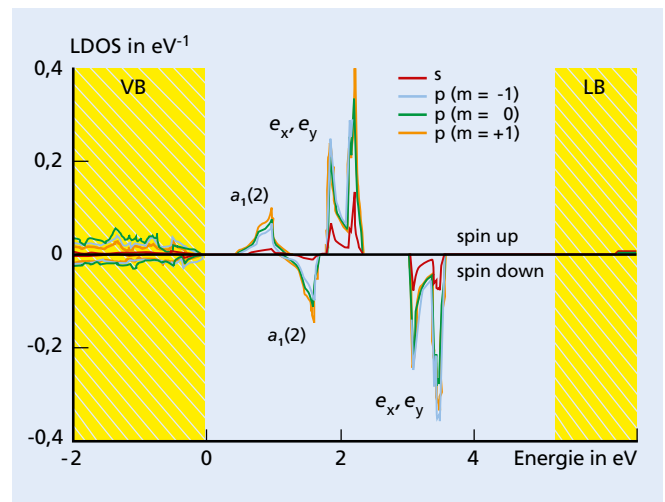
GRUNDLAGEN IM QUANTEN-MAGNETOMETER: ENTWICKELT FÜR BERÜHRUNGSLOSE MATERIALPRÜFUNG

Die Vermessung und Optimierung komplexer nanostrukturierter Schaltkreise, die Sichtbarmachung einzelner Bits in elektronischen Speichermedien sowie die kontaktfreie Materialprüfung zur Detektion kleinster Risse – all dies sind vielversprechende Anwendungsfelder für den Einsatz neuartiger Quanten-Magnetometer. Damit diese Visionen Realität werden, hat sich das Fraunhofer IWM mit fünf weiteren Fraunhofer-Instituten (IAF, IPM, IMM, IISB und CAP) im Fraunhofer-Leitprojekt »Quantenmagnetometrie (QMag)« zusammengeschlossen.

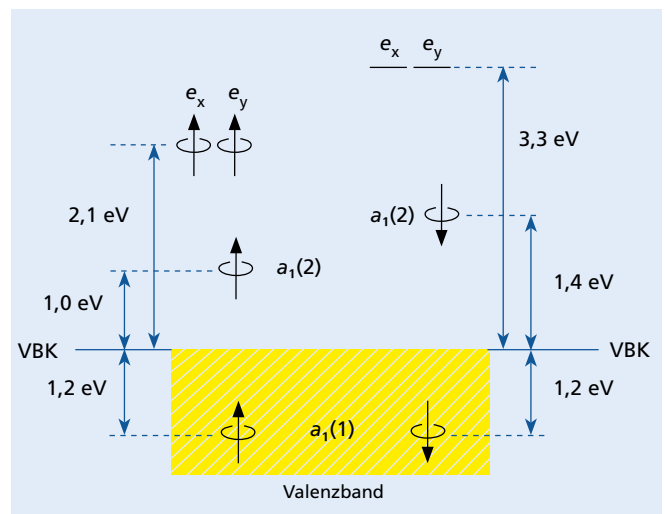
Die Magnetometrie hat das Ziel, Magnetfelder hochpräzise und auf kleinster Skala orts aufgelöst zu messen. In der Medizintechnik werden dafür erfolgreich und standardmäßig supraleitende Tunnelkontakte erfolgreich eingesetzt, etwa zur Untersuchung von Hirnströmen. Ein entscheidender Nachteil ist jedoch, dass die SQUID-Sensoren aufwändig auf Temperaturen nahe null Kelvin gekühlt werden müssen. Die Verwendung sogenannter NV-Zentren in Diamant bietet hingegen erstmals die Möglichkeit, eine entsprechend hohe Messempfindlichkeit bei Raumtemperatur zu erreichen. Zudem ist eine sehr hohe Ortsauflösung im Nanometerbereich möglich, hundertmal genauer als der Stand der Technik.

NV-Defektkomplex in Diamant

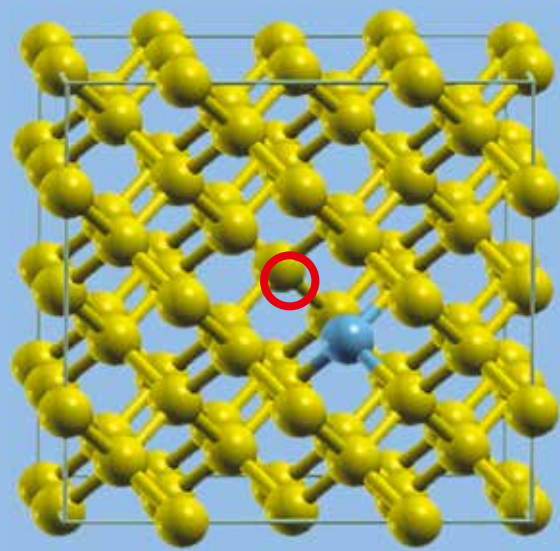
Was versteht man unter einem NV-Zentrum, und wie ist dieses aufgebaut? Ausgangspunkt ist ein Diamantkristall, in dem ein Kohlenstoffatom durch ein Stickstoffatom (N) ersetzt wird, in dessen direkter Nachbarschaft ein weiteres Kohlenstoffatom fehlt, eine sogenannte Kohlenstoff-Vakanz (Abbildung 3). Die durch diesen Defektkomplex hervorgerufenen Änderungen in der Elektronenstruktur des Diamanten lassen sich gezielt durch Laser manipulieren und als ein Spinqubit präparieren, also als



1 Lokale spinabhängige Zustandsdichten (LDOS) benachbarter C-Atome (unten), aufgespalten in Anteile der s- und p-Orbitale; gelb unterlegt: Valenzband (VB) und Leitungsband (LB).



2 Berechnete spinaufgelöste Einelektronenniveaus relativ zur Valenzbandkante (VBK) in guter Übereinstimmung mit Literaturwerten (vgl. Gali et al. PRB 77, 155206).



3 Atomistisches Superzellenmodell eines NV-Zentrums in Diamant:
gelb Kohlenstoff, blau Stickstoff, rot Sauerstoffleerstelle.

ein Zweizustands-Quantensystem: Dieser elementarste Magnet reagiert hochsensibel auf äußere Magnetfelder, was wiederum durch Laser registriert werden kann.

Mit einem NV-Defekt in einer Diamantspitze eines Rasterkraftmikroskops bietet sich erstmals die Möglichkeit, auf atomarer Skala Magnetfeldverteilungen zu messen. Befinden sich jedoch in der Nähe des NV-Zentrums Gitterverzerrungen, atomare Fehlstellen, Korngrenzen, Versetzungen oder gar Oberflächen, so haben diese einen unerwünschten Einfluss auf dessen Energieniveaus. Mit physikalischen Modellen und theoretischen Methoden (wie der Dichtefunktionaltheorie) unterstützt das Fraunhofer IWM seine Partner beim Bau hochempfindlicher Magnetometer. Die eigens entwickelten Modelle verbessern das Verständnis der Vorgänge auf atomarer Skala und erlauben die quantitative Berechnung von Störeinflüssen. Befindet sich ein NV-Defektkomplex sehr nah an der Oberfläche der Diamantspitze, so besitzt er eine andere Resonanzfrequenz als wenn er tief im perfekt kristallinen Diamantbereich lokalisiert ist. Der Defekt darf jedoch nicht zu weit von der Spitze entfernt sein, um die angestrebte Ortsauflösung der Magnetfeldmessung zu gewährleisten. Welcher Abstand zur Oberfläche ist nun ein guter Kompromiss? Welche Einflüsse haben verschiedene kristallographische Terminierungen von Oberflächen? Diese und andere Fragen geht das Fraunhofer IWM im Projekt an und beantwortet so genau wie möglich, was bei der Kalibrierung und Interpretation realer Messergebnisse von Nutzen sein wird.

NV-Defektenergieniveaus im Einkristall

Zum Start des Projekts untersuchten wir das Energieniveauschema des isolierten (idealen) NV-Defektkomplexes und berechneten mit hoher Genauigkeit die beteiligten elektro-

nischen Energieniveaus. Die Energieunterschiede zwischen diesen Niveaus bestimmen die Laserfrequenzen, die zur Realisierung des gewünschten Spinqubits benötigt werden. Abbildung 1 zeigt die lokale Zustandsdichte (LDOS) der an den Defekt angrenzenden C-Atome. Die Defektniveaus inmitten der Bandlücke gehören zu den für die Magnetometrie interessanten Elektronenzuständen. Die Ergebnisse unserer bisherigen Rechnungen sind in einem Termschema in Abbildung 2 zusammengefasst. Sie stimmen mit den Vorarbeiten anderer Theoriegruppen sehr gut überein.

Diese NV-Defektenergieniveaus im Einkristall sind nun der Ausgangspunkt, um die Vielzahl der oben erwähnten Störeinflüsse zu untersuchen. Wir vergrößern dafür die in Abbildung 3 gezeigte Simulations-Superzelle, ergänzen sie um strukturelle Defekte und berechnen die modifizierten Energieniveaus.

Magnetometrie für Werkstoffcharakterisierung und Bauteilprüfung

Die berührungslose und zerstörungsfreie Materialprüfung, beispielsweise von hochfesten Stählen, ist ein vielversprechendes Anwendungsgebiet der Quantenmagnetometrie. Die hochempfindliche 3D-Magnetfeldmessung bietet erstmals das Potenzial, Mikrorisse im Material – welche Ausgangspunkt von Überlastung und Bauteilversagen sein können – bei zyklischen Belastungstests ortsaufgelöst zu erfassen. Im Bereich makroskopischer Tests sind solche magnetisch messenden Verfahren bekannt und etabliert, zum Beispiel bei der Wirbelstromprüfung. Drei bis vier geometrische Größenordnungen darunter, bei Mikrorissen nahe der Rauheitsgrenze des Prüflings, betreten wir jedoch wissenschaftliches Neuland.

Dr. Wolfgang Körner, Dr. Daniel Urban